

ACTA PHYSICA

ACADEMIAE SCIENTIARUM
HUNGARICAE

ADIUVANTIBUS

Z. GYULAI, L. JÁNOSSY, I. KOVÁCS, K. NOVOBÁTZKY

REDIGIT

P. GOMBÁS

TOMUS VI



1957

ACTA

PHYSICA

ACADEMIAE SCIENTiarum

STOCKHOLMENSIS

ÜBER DIE WECHSELWIRKUNG DES NUKLEONS MIT DEM MESONFELD

Von

NIKOLA ST. KALITZIN

PHYSIKALISCHES INSTITUT, BULGARISCHE AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN, SOFIA, BULGARIEN

(Vorgelegt von K. Novobátzky. — Eingegangen: 19. XI. 1954)

In dieser Arbeit schlagen wir ein neues Gleichungssystem vor, welches die Wechselwirkung des Nukleons mit dem Mesonfeld beschreiben soll und welches als Grundgleichungssystem einer neuen Quantenmesodynamik genommen werden kann. Da das neue Gleichungssystem von den Grundgleichungen der Quantenelektrodynamik nicht wesentlich verschieden ist, sogar, topologisch gesehen, mit diesen letzten fast identisch ist, so dürfen wir daraus den wichtigen Schluss ziehen: die auf das neue Gleichungssystem gebaute Quantenmesodynamik wird, wie die Quantenelektrodynamik selbst, eindeutig renormalisierbar sein. Bekanntlich sind sämtliche jetzt vorhandene Theorien in der Quantenmesodynamik entweder nicht renormalisierbar oder nicht eindeutig renormalisierbar. Ausserdem, um die spinabhängige Wechselwirkung der Nukleone zu beschreiben, ist man bei den modernen Kerntheorien gezwungen, Ableitungen der Wellenfunktionen des Mesonfeldes nach den Koordinaten in einer Hamilton-Funktion der Wechselwirkung einzuführen, womit die spezifischen Schwierigkeiten der Mesodynamik entstehen: die Streuquerschnitte wachsen unbegrenzt mit der Energiesteigerung. In unserer Theorie sind, ganz ähnlich wie in der Elektrodynamik, diese Schwierigkeiten vermieden, da in der neuen Hamilton-Funktion der Wechselwirkung nur das Tensorpotential $\varphi_{\alpha\beta\gamma}$, welches den Spin in »sich selbst« enthält, vorkommt, und seine Ableitungen nach den Koordinaten nicht auftreten.

I

Zur Aufstellung des neuen Gleichungssystems benutzen wir, wie in [1], einen pseudoeuklidischen Raum $E_6(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$. Die drei Koordinaten x_3, x_4, x_5 sind die gewöhnlichen kartesischen Koordinaten unseres physikalischen Raumes $E_3(x_3, x_4, x_5)$. Die Koordinate x_6 ist die Einsteinsche relative Zeit. Die Koordinaten x_1 und x_2 sind reell.

In [1] haben wir die folgende Verallgemeinerung der Diracschen Gleichung in E_6 für ein freies Nukleon erhalten

$$(\hbar = c = 1)$$

$$\left(a_\sigma \frac{\partial}{\partial x_\sigma} - i a_7 m_0 \right) \psi = 0, \quad (1)$$

$$\sigma = 1, 2, \dots, 6.$$

Über zweimal vorkommende Indices in einem Glied ist zu summieren!) ψ ist

ein Spinor in E_8 mit 8 Komponenten. α_σ, α_7 sind achtreihige Matrizen und zwar

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_y \\ -\sigma_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma_y & 0 & 0 \end{pmatrix}; & \alpha_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sigma_y \\ \sigma_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma_y & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \alpha_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\sigma_z \\ 0 & 0 & \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z & 0 & 0 \\ -\sigma_z & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; & \alpha_4 &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \alpha_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\sigma_x \\ 0 & 0 & \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x & 0 & 0 \\ -\sigma_x & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; & \alpha_6 &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\sigma_y \\ 0 & 0 & -\sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y & 0 & 0 \\ -\sigma_y & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \alpha_7 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3)$$

$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, 1$ sind die Paulischen zweireihigen Matrizen. Für die Matrizen α_j $j=1, \dots, 7$ sind die folgenden Beziehungen gültig

$$\begin{aligned} \alpha_1^2 &= \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \alpha_4^2 = \alpha_5^2 = \alpha_7^2 = 1; \alpha_6^2 = -1; \\ \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i &= 0, \\ i &\neq j; \quad i, j = 1, 2, \dots, 7. \end{aligned} \quad (3)$$

Wir führen noch die folgenden Matrizen ein

$$i \alpha_7 \alpha_n = \beta_n; \quad n = 1, 2, \dots, 5, \quad (4)$$

$$- \alpha_7 \alpha_6 = \beta_0.$$

Es gilt

$$\beta_\mu \beta_\nu + \beta_\nu \beta_\mu = 2 \delta_{\mu\nu}, \quad (5)$$

$$\beta_\mu^+ = \beta_\mu; \quad \tilde{\beta}_\mu = \beta_\mu^*. \quad (6)$$

β_μ^+ bedeutet die zu β_μ hermitisch-konjugierte Matrix, $\tilde{\beta}_\mu$ — die transponierte Matrix. β_μ^+ ist die konjugierte Matrix.)

Wir führen noch die Bezeichnung ein

$$x_0 = i x_6. \quad (7)$$

Wir multiplizieren Gl. (1) von links mit $i\alpha_7$ und erhalten

$$\left(\beta_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + m_0 \right) \psi = 0, \quad \mu = 0, 1, 2, \dots, 5. \quad (8)$$

Wenn wir die zu Gl. (8) konjugiert-komplexe Gl. nehmen, die Beziehung (6) und

$$\tilde{\beta}_\mu \psi = \psi \beta_\mu \quad (9)$$

benutzen und die resultierende Gl. mit β_0 von rechts multiplizieren, dann erhalten wir

$$\bar{\psi} \left(\beta_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - m_0 \right) = 0, \quad (10)$$

wobei

$$\bar{\psi} = \psi^* \beta_0 \quad (11)$$

ist.

Wenn wir Gl. (8) von links mit $\bar{\psi}$ und Gl. (10) von rechts mit ψ multiplizieren und die Resultate addieren, so bekommen wir

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} (\bar{\psi} \beta_\mu \psi) = 0. \quad (12)$$

Es ist leicht zu beweisen, dass $\bar{\psi} \beta_\mu \psi$ einen Vektor in E_6 darstellt. Bei einer unendlich kleinen Drehung in E_6 nämlich, transformiert sich der Spinor ψ folgendermassen

$$\psi = (1 - \Delta_{\mu\nu} \beta_\mu \beta_\nu) \psi', \quad (13)$$

wobei $\Delta_{\mu\nu}$ den antisymmetrischen Tensor der unendlich kleinen Drehung in E_6 bedeutet.

Der zu (13) konjugiert-komplexe Ausdruck liefert

$$\bar{\psi} = \bar{\psi}' (1 - \Delta_{\mu\nu} \beta_\nu \beta_\mu). \quad (14)$$

Es lässt sich mit Hilfe von (13) und (14) leicht beweisen, dass sämtliche Grössen

$$\bar{\psi} \overbrace{\beta_\mu \beta_\nu \dots \beta_\lambda}^n \psi, \quad \mu \neq \nu \neq \dots \neq \lambda \quad (15)$$

antisymmetrische Tensoren n -ten Ranges in E_6 darstellen ($n \leq 6$).

Der Vergleich mit [1] ergibt die folgende physikalische Bedeutung der Tensoren (15):

$$\begin{aligned}
 i \psi \beta_\mu \psi & \text{ — Vektor des Nukleonstromes in } E_6, \\
 \mu_{\nu\sigma} = -i \frac{e}{2 m_0} \bar{\psi} \beta_\nu \beta_\sigma \psi & \text{ Tensor des magnetischen Nukleonmomentes in } E_6, \\
 + \frac{1}{2} \bar{\psi} \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \psi & \text{ Tensor des Nukleonspins in } E_6, \\
 \nu_{\sigma\varrho\tau\mu} = -i \frac{e}{2 m_0} \bar{\psi} \beta_\sigma \beta_\varrho \beta_\tau \beta_\mu \psi & \text{ Tensor des isotopischen magnetischen Momentes des Nukleons in } E_6, \\
 - \frac{1}{2} i \bar{\psi} \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \beta_\varrho \beta_\tau \psi & \text{ Tensor des isotopischen Nukleonspins in } E_6.
 \end{aligned} \tag{16}$$

II

Man kann die allgemeine Lösung von Gl. (1) in einem Fourier-Integral folgendermassen darstellen

$$\psi = \int \psi(k_n) e^{i k_n x_n} dk_1 dk_2 \dots dk_5, \quad n = 1, 2, \dots, 5. \tag{17}$$

Wir setzen (17) in Gl. (1) ein und bekommen

$$(a_n k_n - a_7 m_0) \psi(k_n) + a_6 \frac{1}{i} \frac{\partial \psi(k_n)}{\partial x_6} = 0. \tag{18}$$

Die Lösung der Gl. (18) suchen wir in der Form

$$\psi(k_n) = \psi_0(k_n) e^{-i \Theta x_6}. \tag{19}$$

Aus Gl. (18) und (19) ergibt sich die Gleichung

$$(a_n k_n - a_7 m_0 - a_6 \vartheta) \psi(k_n) = 0. \tag{20}$$

Damit das Gleichungssystem (20) eine von Null verschiedene Lösung besitzt, muss die Determinante der Koeffizienten gleich Null sein. Das ergibt die Beziehung (nach [1])

$$\vartheta^2 - m_0^2 - k_n^2 = 0. \tag{21}$$

Daraus bekommen wir die Frequenz

$$\vartheta = \pm \varepsilon ,$$

$$\varepsilon = \sqrt{m_0^2 + k_n^2} . \quad (22)$$

Die allgemeine Lösung von Gl. (1) lautet

$$\psi = \psi^{(+)} + \psi^{(-)} , \quad (23)$$

wobei

$$\psi^{(+)} = \int \psi_0^{(+)}(k_n) e^{i k_n x_n - i \varepsilon x_6} dk, dk_2 \dots dk_5 ,$$

$$(24)$$

$$\psi^{(-)} = \int \psi_0^{(-)}(k_n) e^{i k_n x_n + i \varepsilon x_6} dk, dk_2 \dots dk_5 .$$

Wir nehmen an, dass die Energie des Nukleons immer positiv ist

$$\varepsilon = |\Theta| .$$

Die Wellenfunktion mit negativer Frequenz soll das Antinukleon beschreiben. Nach (20) befriedigt die Wellenfunktion $\psi^{(-)}(k_n)$ die Gleichung

$$(a_n k_n - a_7 m_0 + a_6 \varepsilon) \psi^{(-)}(k_n) = 0 .$$

Seine konjugiert-komplexe Gleichung lautet

$$(a_n^* k_n^* - a_7^* m_0 + \varepsilon a_6^*) \psi^{(-)*}(k_n) = 0 . \quad (25)$$

Wir multiplizieren Gl. (25) von links mit der Matrix

$$C = a_2 a_4 a_7 . \quad (26)$$

Diese Matrix besitzt die folgenden Eigenschaften

$$C^2 = -1 ; \quad C = -\tilde{C} = -C^+ ;$$

$$C a_\mu^* = -a_\mu C ; \quad \mu = 1, 2, \dots, 6 , \quad (27)$$

$$C a_7^* = a_7 C .$$

Es ergibt sich

$$(-a_n k_n - a_7 m_0 - \varepsilon a_6) C \psi^{(-)*}(k_n) = 0. \quad (28)$$

Wir definieren weiter die Funktion

$$\psi^{(a)}(k_n) = C \psi^{(-)*}(-k_n), \quad (29)$$

also

$$\psi^{(-)}(-k_n) = -C \psi^{(a)*}(k_n). \quad (30)$$

Aus Gl. (28) und (29) folgt

$$(a_n k_n - a_7 m_0 - \varepsilon a_6) \psi^{(a)}(k_n) = 0. \quad (31)$$

Da

$$\psi^{(a)}(x_n) = \int \psi^{(a)}(k_n) e^{i k_n x_n} dk_1 dk_2 \dots dk_5$$

ist, so ergibt sich, dass die Wellenfunktion

$$\psi^{(a)}(x_n) = C \psi^{(-)*}(x_n) \quad (32)$$

die Wellengleichung (1) mit positiver Frequenz befriedigt. Wir können also $\psi^{(a)}$ als die Wellenfunktion des Antinukleons bezeichnen.

Betrachten wir jetzt die folgende Transformation der allgemeinen Lösung von Gl. (1)

$$\psi' = C \psi^* \quad (33)$$

Es lässt sich leicht zeigen, dass ψ' ebenfalls die Gl. (1) befriedigt. Die allgemeine Lösung von Gl. (1)

$$\psi = \psi^{(n)} - C \psi^{(a)*} \quad (34)$$

transformiert sich nach (33) in

$$\psi' = \psi^{(a)} + C \psi^{(n)*}, \quad (35)$$

wobei wir $\psi^{(+)}$ mit $\psi^{(n)}$, die Wellenfunktion des Nukleons, bezeichnet haben. ψ geht in ψ' über, wenn wir $\psi^{(n)}$ durch $\psi^{(a)}$ und $\psi^{(a)}$ durch $-\psi^{(n)}$ ersetzen.

III

Die Grundgleichungen der Nukleonwechselwirkung mit dem Mesonfeld bekommen wir auf Grund der folgenden Überlegungen:

1. Die Kernkräfte sind spinabhängig. Infolgedessen können wir den Nukleonspin als »Quelle« des Mesonfeldes betrachten. Das lässt sich erreichen, wenn wir ein Tensorpotential $\varphi_{\alpha\beta\gamma}$ (vergl. [2]) für das Mesonfeld einführen.

2. Nach [2] garantiert das Potential $\varphi_{\alpha\beta\gamma}$ die Stabilität des Atomkernes $\left(\text{Potential } U \sim \frac{1}{\tau} \right)$. Die Kernkräfte sind hierbei spinabhängig.

3. In der Hamiltonfunktion der Wechselwirkung dürfen keine Ableitungen von $\varphi_{\alpha\beta\gamma}$ nach den Koordinaten auftreten. Sonst würden die Streuquerschnitte unbegrenzt mit der Energiesteigerung anwachsen. Die Grundgleichung der Mesodynamik muss also ähnlich der Diracschen Wellengleichung für ein im elektromagnetischen Feld sich bewegendes Elektron sein.

Die obigen drei Forderungen ergeben uns die folgende Wellengleichung, welche die Bewegung des Nukleons in einem gegebenen Mesonfeld beschreibt

$$\left[\beta_{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial X_{\mu}} - \frac{g}{6} \beta_{\nu} \beta_{\sigma} \varphi_{\mu\nu\sigma} \right) + m_0 \right] \psi = 0, \quad (36)$$

$$\mu, \nu, \sigma = 0, 1, \dots, 5.$$

$\varphi_{\mu\nu\sigma}$ ist das Tensorpotential des Mesonfeldes. ($\varphi_{\mu\nu\sigma}$ ist ein antisymmetrischer Tensor dritten Ranges in E_6). g ist die Kupplungskonstante des Nukleons mit dem Mesonfeld (entspricht der elektrischen Ladung e in der Elektrodynamik).

Wir multiplizieren die zu (36) konjugiert-komplexe Gleichung von links mit $\bar{\psi}$, und erhalten unter Beachtung von (6), (9) und (11)

$$\bar{\psi} \left[\beta_{\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \frac{g^*}{6} \beta_{\nu} \beta_{\sigma} \varphi_{\mu\nu\sigma} \right) - m_0 \right] = 0. \quad (37)$$

Dabei haben wir

$$\varphi_{nmp}^* = \varphi_{nmp}; \quad \varphi_{omp}^* = -\varphi_{omp} \quad (38)$$

$$m, n, p = 1, 2, \dots, 5$$

angenommen.

Die Bedingung (38) bedeutet, dass wir ein neutrales Mesonfeld benutzen. Wenn wir ein elektrisch geladenes Mesonfeld in Betracht ziehen wollen, dann müssen wir $\varphi_{\mu\nu\sigma}$ in Gl. (37) durch $\varphi_{\mu\nu\sigma}^+$ ersetzen, wobei

$$\varphi_{mnp}^+ = \varphi_{mnp}^* \neq \varphi_{mnp}$$

und

$$\varphi_{omp}^+ = -\varphi_{omp}^* \neq -\varphi_{omp}$$

ist. Wir werden aber im weiteren unsere Betrachtungen auf ein neutrales Mesonfeld beschränken.

Aus Gl. (36) und (37) bekommen wir die Beziehung

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} (\bar{\psi} \beta_\mu \psi) + (g^* - g) \frac{1}{6} \bar{\psi} \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \psi \cdot \varphi_{\mu\nu\sigma} = 0. \quad (40)$$

Damit die Kontinuitätsbedingung (12) des Nukleonstromes in E_6 bestehen bleibt, müssen wir annehmen

$$g^* = g. \quad (41)$$

Die Kernladung g also ist reell, im Gegensatz zur elektrischen Ladung, welche in der Grundgleichung der Quantenelektrodynamik

$$\left[\gamma_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} - i e A_j \right) + m \right] \psi = 0, \quad (42)$$

$j = 1, 2, 3, 4; \gamma_j - \text{Diracsche Matrizen},$

als rein imaginäre Konstante ie erscheint.

Daraus können wir sofort den wichtigen Schluss ziehen: die gleichgeladenen Nukleone, wie Proton und Proton, Neutron und Neutron, Proton und Neutron usw. *ziehen sich an*. Diese experimentelle Tatsache ergibt sich als zwangsläufig aus unserer Theorie.

Mit Beziehung (41) nimmt Gl. (37) die folgende Form an

$$\bar{\psi} \left[\beta_\mu \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{g}{6} \beta_\nu \beta_\sigma \varphi_{\mu\nu\sigma} \right) - m_0 \right] = 0. \quad (43)$$

Um die ladungskonjugierte Funktion von ψ , nämlich $\psi' = C\psi^*$ zu erhalten, multiplizieren wir die zu Gl. (36) konjugiert-komplexe Gl. von links mit der Matrix C . Unter Beachtung der Beziehungen

$$\begin{aligned} C\beta_0^* &= -\beta_0 C; \\ C\beta_n^* &= \beta_n C; \quad n = 1, 2, \dots, 5 \end{aligned} \quad (44)$$

ergibt sich

$$\left[\beta_\mu \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{g}{6} \beta_\nu \beta_\sigma \varphi_{\mu\nu\sigma} \right) + m_0 \right] \psi' = 0. \quad (45)$$

is gilt also auch

$$\bar{\psi}' \left[\beta_\mu \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{g}{6} \beta_\nu \beta_\sigma \varphi_{\mu\nu\sigma} \right) - m_0 \right] = 0, \quad (46)$$

wobei

$$\bar{\psi}' = (\psi')^* \beta_0 = \psi \beta_0 C \quad (47)$$

st.

Gleichung (45) ist mit Gleichung (36) identisch. Das gleiche gilt auch von Gleichungen (43) und (46).

Wenn wir nur Lösungen mit positiver Frequenz betrachten, dann ist ψ durch $\psi^{(n)}$ und ψ' durch $\psi^{(a)}$ zu ersetzen. Dann folgt aus (45), dass die Kernladung g des Antinukleons gleich der Kernladung des Nukleons ist. Daraus folgt aber, dass ein Nukleon und ein Antinukleon, wie z. B. ein Proton und ein Antiproton, sich ebenso anziehen werden wie zwei gleiche Nukleone, wie Proton und Proton. Diese Folgerung unserer Theorie wird sich leicht experimentell nachprüfen lassen, sobald man, wie wir hoffen in kurzer Zeit, die Antinukleone künstlich herzustellen imstande sein wird. Da bei sämtlichen vorhandenen Kerntheorien dem Antinukleon die zur Kernladung des Nukleons entgegengesetzte Kernladung zugeschrieben wird, so kann also eine experimentelle Entscheidung zwischen der neuen und den alten Kerntheorien bald getroffen werden.

Für das freie Mesonfeld sollen die Differentialgleichungen erfüllt sein

$$\frac{\partial^2 \varphi_{\mu\nu\sigma}}{\partial x_\lambda^2} = 0; \quad (48)$$

$$\frac{\partial \varphi_{\mu\nu\sigma}}{\partial x_\mu} = 0. \quad (49)$$

Wenn ein Nukleonstrom vorhanden ist, dann sollen die folgenden Gleichungen gelten (in Analogie zur Elektrodynamik):

$$\frac{\partial^2 \varphi_{\mu\nu\sigma}}{\partial x_\lambda^2} + j_{\mu\nu\sigma} = 0, \quad (50)$$

wobei

$$j_{\mu\nu\sigma} = \frac{g}{2} [\bar{\psi}, \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \psi]$$

st.

$$[\bar{\psi}, \beta_\mu, \beta_\nu, \beta_\sigma \psi] = \bar{\psi} \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \psi + \bar{\psi}' \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \psi.$$

In Gleichung (51) erscheint der Spin des Nukleons als »Quelle« des Mesonfeldes, was mit der Erfahrung in Einklang steht.

Topologisch gesehen, sind die in diesem Kapitel entwickelten Gleichungen der Nukleonswechselwirkung mit dem Mesonfeld mit den Grundgleichungen der Quantenelektrodynamik fast identisch.

Um vom Raume E_6 zu dem Minkowski—Raum $E_4(x_3, x_4, x_5, x_6)$ überzugehen, führen wir, wie in [1] und [2], die folgenden symbolischen Gleichungen ein

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} &= i\omega, \\ \frac{\partial}{\partial x_2} &= i\lambda. \end{aligned} \quad (51)$$

ω, λ sind Konstanten. $\mu = \sqrt{\omega^2 + \lambda^2}$ ist die Mesonmasse. Die Operatoren (51) wirken auf ψ und $\varphi_{\mu\nu\sigma}$. Dann geht Gl. (50) in die Grundgleichung des Mesonpotentials, die zuerst von Yukawa vorgeschlagen wurde, über. Die Kontinuitätsgleichung des Nukleonstromes in E_6 (12) geht hierbei in die in E_4 geltende Kontinuitätsgleichung über.

IV

Gleichung (33) lässt sich auch folgendermassen darstellen

$$\psi' = C \psi^* = \bar{\psi} C', \quad (52)$$

wobei

$$C' = -\beta_0 C \quad (53)$$

ist.

Die Matrix C' hat die Eigenschaften

$$\begin{aligned} C'^+ &= C'; & C'^* &= C'; & C'^2 &= 1; \\ \tilde{C}' &= C'; \end{aligned} \quad (54)$$

$$C'(\beta_\mu)^* C'^{-1} = -\beta_\mu. \quad (55)$$

Aus diesen Eigenschaften folgen die Gleichungen

$$\psi \bar{\beta}_\nu \bar{\psi} = \bar{\psi}' \beta_\nu \psi', \quad (56)$$

$$\psi \bar{\psi} = -\bar{\psi}' \psi'; \quad (57)$$

$$\psi \overline{\beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \psi} = \bar{\psi}' \beta_\sigma \beta_\nu \beta_\mu \psi'; \quad (58)$$

$$\psi' \tilde{\beta}_\nu \bar{\psi}' = \bar{\psi} \beta_\nu \psi; \quad (59)$$

$$\psi' \bar{\psi}' = -\bar{\psi} \psi; \quad (60)$$

$$\psi' \overline{\beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \psi'} = \bar{\psi} \beta_\sigma \beta_\nu \beta_\mu \psi; \quad (61)$$

$$\begin{aligned} \bar{\psi}' \left[\beta_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{g}{6} \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \varphi_{\mu\nu\sigma} + m_0 \right] \psi' = \\ = \psi \left[\tilde{\beta}_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{g}{6} \overline{\beta_\sigma \beta_\nu \beta_\mu} \varphi_{\mu\nu\sigma} - m_0 \right] \bar{\psi}; \end{aligned} \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \bar{\psi} \left[\beta_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{g}{6} \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \varphi_{\mu\nu\sigma} + m_0 \right] \psi = \psi' \left[\tilde{\beta}_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \right. \\ \left. - \frac{g}{6} \overline{\beta_\sigma \beta_\nu \beta_\mu} \varphi_{\mu\nu\sigma} - m_0 \right] \bar{\psi}'. \end{aligned} \quad (63)$$

Mit Hilfe von (62) und (63) kann man die Grundgleichungen unserer Theorie (36), (43), (45), (46) und (50) aus einem Variationsprinzip, nämlich

$$\delta \int L d^4x = 0 \quad (64)$$

bleiten, indem man für die Lagrangefunktion L den Ausdruck einsetzt

$$\begin{aligned} L = & -\frac{1}{12} \frac{\partial \varphi_{\mu\nu\sigma}}{\partial x_\lambda} \frac{\partial \varphi_{\mu\nu\sigma}}{\partial x_\lambda} - \frac{1}{2} \bar{\psi} \left[\beta_\mu \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{g}{6} \beta_\nu \beta_\sigma \varphi_{\mu\nu\sigma} \right) + m_0 \right] \psi - \\ & - \frac{1}{2} \bar{\psi}' \left[\beta_\mu \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{g}{6} \beta_\nu \beta_\sigma \varphi_{\mu\nu\sigma} \right) + m_0 \right] \psi' = -\frac{1}{12} \frac{\partial \varphi_{\mu\nu\sigma}}{\partial x_\lambda} \frac{\partial \varphi_{\mu\nu\sigma}}{\partial x_\lambda} - \\ & - \frac{1}{2} \bar{\psi} \left[\beta_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + m_0 \right] \psi - \frac{1}{2} \bar{\psi}' \left[\beta_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + m_0 \right] \psi' + \frac{1}{6} j_{\mu\nu\sigma} \varphi_{\mu\nu\sigma}. \end{aligned} \quad (65)$$

Bei der Variation in (64) müssen wir $\varphi_{\mu\nu\sigma}$, ψ , $\bar{\psi}$ (bzw. $\varphi_{\mu\nu\sigma}$, ψ' , $\bar{\psi}'$) als unabhängige Veränderliche betrachten. Die Glieder, welche bei der Variation die Form einer Divergenz erhalten, werden weggestrichen, da die Integrale über diese Glieder verschwinden.

Die Lagrangefunktion L , welche an die Spitze unserer Theorie gestellt werden kann, ist fast identisch mit der Lagrangefunktion L' , welche die Grundlage der Quantenelektrodynamik bildet,

$$L' = -\frac{1}{2} \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \bar{\psi} \left[\gamma_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} - i e A_j \right) + m \right] \psi - \\ - \frac{1}{2} \bar{\psi}' \left[\gamma_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} + i e A_j \right) + m \right] \psi'$$

$i, j = 1, 2, \dots, 4$; ψ — der Spinor von der Diracschen Theorie.

In den Wechselwirkungsgliedern von L genauso wie in denen von L' treten keine Ableitungen des Feldpotentials nach den Koordinaten auf. Daraus zieht wir den Schluss, dass die Streuquerschnitte in der neuen Mesodynamik, ebenso wie in der Elektrodynamik, mit der Energiesteigerung nicht unbegrenzt anwachsen können.

Die Lagrangefunktion L' der Quantenelektrodynamik ist invariant gegenüber den folgenden Transformationen:

- a) die Lorentztransformation,
- b) die Eichtransformation,
- c) die ladungskonjugierte Transformation.

Die neue Lagrangefunktion L , welche zusammen mit Bedingung (5) als Grundlage einer neuen Quantenmesodynamik genommen werden kann, ist ebenfalls gegenüber den obigen Transformationen invariant. Da die Fälle a) und c) sich einfach erledigen lassen, wenden wir unsere Aufmerksamkeit dem Fall b) zu.

Die Eichtransformation besteht bei uns aus folgenden Transformationen:

$$\varphi_{\mu\nu\sigma} \rightarrow \varphi_{\mu\nu\sigma} - \zeta_{[\mu\nu, \sigma]},$$

$$\psi \rightarrow e^{-ig\eta} \psi,$$

$$\psi' \rightarrow e^{ig\eta} \psi',$$

wobei

$$\zeta_{[\mu\nu, \sigma]} = \frac{\partial \zeta_{\mu\nu}}{\partial x_\sigma} + \frac{\partial \zeta_{\nu\sigma}}{\partial x_\mu} + \frac{\partial \zeta_{\sigma\mu}}{\partial x_\nu}.$$

$\zeta_{\nu\sigma}$ ist antisymmetrischer Tensor in E_6 , Funktion von x_μ ; η — skaläre Funktion von x_μ . Die Transformation (67) in (65) eingesetzt ergibt einen Ausdruck

mit L identisch ist (bis auf Glieder, welche eine Divergenz darstellen oder im Feld nicht abhängen und deswegen bei der Variation fortfallen), wenn Bedingungen erfüllt sind:

$$\frac{\partial^2 \zeta_{\mu\nu}}{\partial x_\lambda^2} = 0, \quad (68)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} (\bar{\psi} \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \psi) \zeta_{\nu\sigma} = \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\bar{\psi}' \beta_\mu \beta_\nu \beta_\sigma \psi') \zeta_{\nu\sigma} = 0. \quad (69)$$

Bedingungen (68) und (69) beschränken die Wahl der Tensorfunktion $\zeta_{\nu\sigma}$.

Unsere Theorie kann aus (64) und (65) mit der zusätzlichen Bedingung 1) entwickelt werden. Wie wir gezeigt haben, sind die Grundgleichungen der neuen Mesodynamik (36), (43), (45), (46) und (50) oder (64) und (65) mit den entsprechenden Gleichungen der Quantenelektrodynamik topologisch und physikalisch gesehen fast identisch. Infolgedessen müssen wir annehmen, dass die auf den neuen Grundgleichungen aufgebaute Quantenmesodynamik, wie die Quantenelektrodynamik selbst, eindeutig renormalisierbar sein wird.

LITERATUR

1. NIKOLA ST. KALITZIN, Acta Phys. Hung., **5**, 15, 1955.
2. NIKOLA ST. KALITZIN, Acta Phys. Hung., **3**, 45, 1953.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НУКЛЕОНА С МЕЗОННЫМ ПОЛЕМ

Н. СТ. КАЛИЦИН

Резюме

Для описания взаимосвязи нуклеона с мезонным полем рекомендуется новая система уравнений. Она может служить основной системой уравнений новой квантовой мезодинамики. Так как эта новая система существенно не отличается от основных уравнений квантовой электродинамики и даже с точки зрения топологии почти совпадает с последними, то можно сделать следующий важный вывод: квантовую мезодинамику, построенную на новой системе уравнений, можно будет однозначно ренормировать точно так же, как и квантовую электродинамику. Как известно, существующие теории квантовой мезодинамики либо не поддаются ренормализации, либо поддаются неоднозначно. Кроме того, с целью описания зависящего от спина взаимодействия нуклеонов современные теоретические теории вынуждены ввести в Гамильтонову функцию взаимодействия произвольные по координатам волновых функций мезонного поля. Вследствие этого возникают серьезные трудности мезодинамики, а именно — сечения рассеяния с ростом энергии бесконечно возрастают. В теории автора, как и в электродинамике, эти трудности устраняются благодаря тому, что в новой гамильтоновой функции взаимодействия встречаются лишь содержащий в себе спин тензорный потенциал $\varphi_{\alpha\beta\gamma}$, производные же по координатам не возникают.



INVESTIGATION OF THE TWO-DIMENSIONAL HOMOLOGOUS SERIES OF AROMATIC COMPOUNDS

By

R. PAUNCZ

INSTITUTE FOR THEORETICAL PHYSICS OF THE UNIVERSITY, SZEGED

(Presented by P. Gombás. — Received 23. VIII. 1955)

On analysing HEILBRONNER's method for the study of the two-dimensional homologous series of aromatic compounds it would appear that whilst it renders correct results for the polycyclic series as well as the square lattice, for the two-dimensional homologous series it does not yield the eigenvalues of the elements of a true two-dimensional homologous series but those of such variants, in which the integral of the Coulomb interaction of the atoms in the uppermost and lowest rows differ by $\pm\beta$ from the integral of the Coulomb interaction of all the other atoms in the molecule. With this fact in mind, and the perturbation theory involved, it is possible to obtain approximate values for the energy values of the elements of the two-dimensional homologous series. The values thus obtained are in good agreement with the eigenvalues calculated by the exact method.

Introduction

For the theoretical investigation of physical and chemical properties of aromatic compounds a simple variant of the molecular-orbital method (linear combination of atomic orbitals) proves to be especially suitable. Experience shows that the method is in particular very advantageous for the examination of members of homologous series. With this method the spectra of the polycyclic series have been successfully investigated by C. A. COULSON [1], the poly-aryl series by C. A. COULSON and G. S. RUSHBROKE [2] and the energetical relations of the graphite crystal have been studied by M. BRADBURN, C. A. COULSON and G. S. RUSHBROKE [3]. To this purpose the energies of the single members of the two-dimensional homologous series (Fig. 1) were calculated, using for the computation of the eigenvalues the method of D. E. RUTHERFORD [4].

Recently the same problem has been investigated by E. HEILBRONNER [5] who using group theoretical considerations gave a method on the basis of which the energies of the members of the two-dimensional homologous series can be explicitly given. His results are better than those of Rutherford as in the latter method the eigenvalues are obtained by solving a trigonometrical equation which, for the higher members of the series, means considerable numerical work.

Recently some members of the two-dimensional homologous series have been studied by us as to their physical and chemical behaviour (R. PAUNCZ

and F. BERENCZ : bisanthene [6], R. PAUNCZ and I. WILHEIM : terrylene, quaterrylene, teranthene [7]); thus the eigenvalues relating to these compounds were at our disposal. Comparing these values with those obtained by HEILBRONNER's formula, it was a surprising result that the spectra obtained

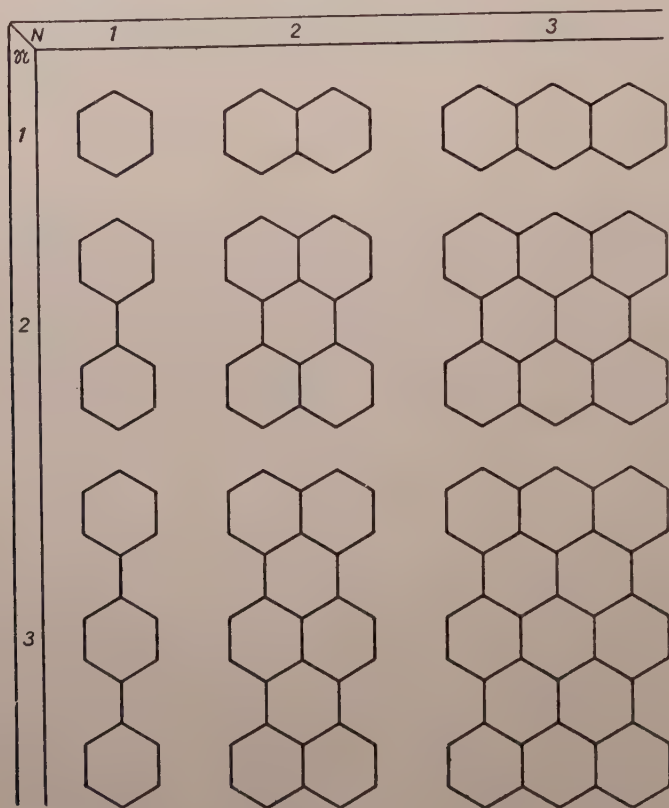


Fig. 1

from the two methods are completely different. This fact induced us to investigate thoroughly HEILBRONNER's method.

Our investigation showed that while the method gives correct results for the polyacene series and the quadratic lattice, its application to the two dimensional homologous series does not give the true eigenvalues but instead the eigenvalues of those variants where the Coulomb integral referring to uppermost and lowermost C atoms of the molecule deviates by $\pm\beta$ from that of the other C atoms.

In the following we give a simple perturbation calculation which, starting from the energy values obtained with HEILBRONNER's method, leads to

approximate values for the energies of the members of the two-dimensional homologous series. The calculations can be carried through very simply and give results in a sufficient approximation.

1. §. Sketch of Heilbronner's method

The essence of HEILBRONNER's method consists in the original idea that a suitable number of the configuration to be examined is considered (if symmetry allows this) and possibly supplemented by further atoms or groups of atoms so as to join them to connected chains, rings or lattices whose higher symmetry renders possible a simple determination of the eigenvalues of the connected configuration. Following this those eigenvectors of the connected configuration are considered for which the coefficient of the atoms or

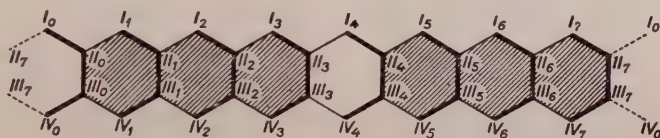


Fig. 2

group of atoms used in the building up is zero. Consequently, the built up configuration breaks up into parts which agree in shape with the one originally investigated, their eigenvalues belonging to the solution of the connected configuration with the above-mentioned properties.

As an example, the eigenvalues of the polyene containing N C-atoms can be obtained if a closed polyene chain is formed from two polyene molecules by the insertion of two C-atoms (the number of C-atoms is $2N + 2$). This latter possesses C_n rotation symmetry ($n = 2N + 2$), which allows an easy determination of the eigenvalues and eigenvectors by using group theoretical considerations. Knowing the energies of the closed polyene chain, the energy value of the opened chain molecule can be obtained by considering the solutions in which the coefficients of the two inserted atoms are zero.

The members of the polyacene series can be derived (in the figure $N = 3$) by taking $2N+2$ 4-atom motives and unifying them to a closed ring possessing rotation symmetry too. From this ring the N -th member of the series can be re-obtained by considering the solutions in which the coefficients of atoms I and IV in the 0-th and $n/2$ -th motive are zero (Fig. 2).

In the above-mentioned two cases the method could be carried through exactly its results being in agreement with those derived with other methods [1]. Similarly, correct results are obtained by E. HEILBRONNER for the quadratic lattice, the eigenvalues being identical with those obtained with HUTHERFORD's method (T. A. HOFFMANN [8]).

2. §. Examination of Heilbronner's method in the case of the two-dimensional homologous series

The NN -th number of the two-dimensional homologous series can, according to HEILBRONNER, be derived in the following manner: $n = 2N + 4$. 4-atom motives have to be joined to a closed ring in the same way as was

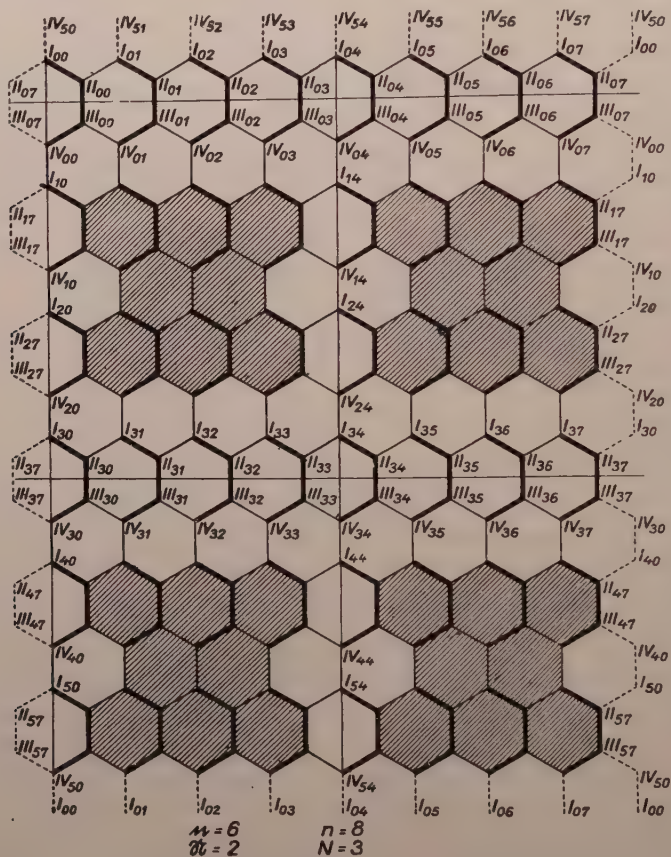


Fig. 3

described for the polyacenes (Fig. 2). Following this $n = 2N + 2$ rings (each ring possesses C_n rotation symmetry) must be connected to a torus surface exhibiting C_n rotation symmetry around the z -axis. The determination of the connected lattice is much facilitated by this twofold rotation symmetry.

From the connected lattice the NN -th member of the two-dimensional homologous series can be obtained if it is possible to find solutions in which the coefficients of atoms merely used to join the four molecules are zero. To determine

whether the required steps can be taken or not, the eigenvalues and eigenvectors of the lattice situated on the torus surface have to be determined.

In Fig. 3 the rectified torus surface is shown, the atoms figuring in the single motives are labelled with two indices the first relating to the row, the second to the column where the given motive can be found.

The torus surface contains $4nn$ atoms; the π -electron functions belonging to the atoms are denoted by

$$u_{I_{ik}}, u_{II_{ik}}, u_{III_{ik}}, u_{IV_{ik}};$$

the coefficients with which these atomic functions occur in the molecular orbitals are marked with

$$I_{ik} \quad II_{ik} \quad III_{ik} \quad \text{and} \quad IV_{ik}.$$

These coefficients (simultaneously with the eigenvalues) may be determined from the secular system of equations of the torus surface and the corresponding determinant, respectively. The secular system of equations containing $4nn$ equations is the following:

$$\begin{aligned} -x I_{ik} + II_{ik} + II_{i,k-1} + IV_{i-1,k} &= 0, \\ I_{ik} - x II_{ik} - III_{ik} + I_{ik+1} &= 0, \\ II_{ik} + IV_{ik} - x III_{ik} + IV_{i,k+1} &= 0, \\ I_{i+1,k} + III_{i,k-1} + III_{ik} - x IV_{ik} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

where $x = \frac{E - a}{\beta}$, $a = \int u_r H u_r d\tau$ (Coulomb integral), $\beta = \int u_r H u_s d\tau$, and s denote indices of neighbouring atoms, H means the effective Hamiltonian.

The $4nn$ equations can be separated into nn systems of equations, each containing 4 unknowns if we take linear combinations corresponding to the irreducible representations of the direct product of the C_n and C_n rotation groups.

$$\begin{aligned} I_{ik}^{(ij)} &= \varepsilon^{jk} \xi_i^{ji} I^{(ij)}, & II_{ik}^{(ij)} &= \varepsilon^{jk} \xi_i^{ji} II^{(ij)}, & \varepsilon &= \exp\left(\frac{2\pi\sqrt{-1}}{n}\right), \\ III_{ik}^{(ij)} &= \varepsilon^{jk} \xi_i^{ji} III^{(ij)}, & IV_{ik}^{(ij)} &= \varepsilon^{jk} \xi_i^{ji} IV^{(ij)}, & \xi &= \exp\left(\frac{2\pi\sqrt{-1}}{n}\right). \end{aligned} \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} -x I^{(ij)} + II^{(ij)}(1 + \varepsilon^{-j}) + IV \xi^{-i} &= 0, \\ I^{(ij)}(1 + \varepsilon^j) - x II^{(ij)} + III^{(ij)} &= 0, \\ II^{(ij)} - x III^{(ij)} + IV^{(ij)}(1 + \varepsilon^j) &= 0, \\ I^{(ij)} \xi^{i1} + III^{(ij)}(1 + \varepsilon^{-j}) - x IV^{(ij)} &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

$$j = 0, 1, \dots, n-1 \quad j = 0, 1, \dots, n-1.$$

The roots of the determinantal equation corresponding to (3) can be obtained with elementary calculation :

$$x^{(ij)} = \pm \sqrt{1 + \vartheta_j \pm \sqrt{\vartheta_j \eta_i}},$$

$$\vartheta_j = 2 \left(1 + \cos \frac{2\pi}{n} j \right), \quad \eta_i = 2 \left(1 + \cos \frac{2\pi}{n} i \right).$$

The solutions of the system of equations (3) can similarly easily be obtained and from them, using (2), the whole system of coefficients of the torus surface can be determined.

$$\left. \begin{aligned} I_i^{(ij)} &= [x^3 - x(1 + \vartheta_j)] \varepsilon^{jk} \xi^{i1}, \\ II_{ik}^{(ij)} &= [x^2 + \vartheta_j + \xi^i] (1 + \varepsilon^j) \varepsilon^{jk} \xi^{i1}, \\ III_{ik}^{(ij)} &= x(1 + \xi^i)(1 + \varepsilon^j) \varepsilon^{jk} \xi^{i1}, \\ IV_{ik}^{(ij)} &= [\vartheta_j + (x^2 - 1) \xi^i] \varepsilon^{jk} \xi^{i1}. \end{aligned} \right\} \quad (5a)$$

The eigenvalue problem is a degenerate one. The roots (4) are obtained even if instead of j ($n-j$) is taken, or instead of i ($n-i$). Thus with the exception of $j = 0, j = n/2$ and $i = 0, i = \frac{n}{2}$ three other systems of coefficients similar to (5a) can be obtained which belong to the same eigenvalues. The system of coefficients (5b) can be derived from that of (5a) by substituting $-j$ for j while (5c) and (5d) can be deduced from (5a) and (5b) changing the sign of i .

For a more convenient review of the symmetry relations it is suitable to pass over to the real system of coefficients. These can be obtained by a suit

table linear combination of the degeneration system of coefficients (5a) — (5d)

$$\left. \begin{aligned} I_{ik}^{(ij)} &= [x^3 - x(1 + \vartheta_j)] \sin i j a \sin j k \omega, \\ II_{ik}^{(jk)} &= [(x^2 - \vartheta_j) \sin i j a + \sin(i+1) j a] (\sin j k \omega + \sin j(k+1) \omega), \\ III_{ik}^{(ij)} &= x [\sin i j a + \sin(i+1) j a] (\sin j k \omega + \sin j(k+1) \omega), \\ IV_{ik}^{(ij)} &= [\vartheta_j \sin i j a + (x^2 - 1) \sin(i+1) j a] \sin j k \omega. \end{aligned} \right\} \quad (6a)$$

$$\omega = \frac{2\pi}{n}, \quad a = \frac{2\pi}{n}.$$

(6b) is deduced from (6a) writing cosine functions instead of $\sin jk\omega$ and $\sin j(k+1)\omega$, (6c) and (6d) are derived from (6a) and (6b) replacing $\sin ija$ and $\sin(j+1)a$ by the corresponding cosine functions.

The following step consists in finding solutions wherein the coefficients of atoms used to join the configuration are zero. This means on the one hand that $I_i, IV_i, I_{i-1}^n, IV_{i-1}^n$ is zero for all i , on the other hand

$$I_{0k} \quad II_{0k} \quad III_{0k} \quad IV_{0k} \quad I_{\frac{n}{2}k} \quad II_{\frac{n}{2}k} \quad III_{\frac{n}{2}k} \quad IV_{\frac{n}{2}k}$$

must be zero for all k .

The first part of the task can be accomplished easily because in the system of coefficients (6a) and (6b) the factor $\sin jk\omega$ occurs in the coefficients of atoms I and IV, thus the first condition is fulfilled. In this case the torus breaks up into two ring surfaces each possessing C_n rotation symmetry. The second condition, however, cannot be fulfilled. Examining the system of coefficients it is evident that no system of solutions can be found wherein

$$\left. \begin{aligned} I_{0k} &= II_{0k} = III_{0k} = IV_{0k} = 0, \\ I_{\frac{n}{2}k} &= II_{\frac{n}{2}k} = III_{\frac{n}{2}k} = IV_{\frac{n}{2}k} = 0. \end{aligned} \right\} \quad \text{for all } k;$$

thus we cannot re-obtain from the torus surface the members of the two-dimensional homologous series.

§. 3. Making use of the system of solutions

Although the eigenvalues of the members of the two-dimensional homologous series cannot be immediately obtained from the eigenvalues of the torus surface, the solutions may serve, however, as a starting point for a perturbation

efficients is a solution of the system of equations of the torus surface as well.

$$\left. \begin{aligned} I_{ik}^{(ij)} &= [\vartheta_j \cos(i+1)ja + (x^2 - 1) \cos ija] \sin jk\omega, \\ II_{ik}^{(ij)} &= x [\cos(i+1)ja + \cos ija] (\sin jk\omega + \sin j(k+1)\omega), \\ III_{ik}^{(ij)} &= [(x^2 - \vartheta_j) \cos(i+1)ja + \cos ija] (\sin jk\omega + \sin j(k+1)\omega), \\ IV_{ik}^{(ij)} &= [x^3 - x(1 + \vartheta_j)] \cos ija \sin jk\omega. \end{aligned} \right\} \quad (7c)$$

The system of coefficients (7c) belongs to the same eigenvalues as (6c), thus their sum and difference can be taken:

$$\left. \begin{aligned} S I_{ik}^{(ij)} &= \{ [x^3 - x(1 + \vartheta_j) + x^2 - 1] \cos ija + \\ &\quad + \vartheta_j \cos(i+1)ja \} \sin jk\omega, \\ S II_{ik}^{(ij)} &= \{ (x^2 + x - \vartheta_j) \cos ija + (x+1) \cos(i+1)ja \} \\ &\quad [\sin jk\omega + \sin j(k+1)\omega], \\ S III_{ik}^{(ij)} &= \{ (x^2 + x - \vartheta_j) \cos(i+1)ja + (x+1) \cos ija \} \\ &\quad [\sin jk\omega + \sin j(k+1)\omega], \\ S IV_{ik}^{(ij)} &= \{ [x^3 - x(1 + \vartheta_j) + x^2 - 1] \cos(i+1)ja + \\ &\quad + \vartheta_j \cos ija \} \sin jk\omega. \end{aligned} \right\} \quad (8c)$$

$$\left. \begin{aligned} A I_{ik}^{(ij)} &= \{ [x^3 - x(1 + \vartheta_j) - x^2 + 1] \cos ija - \\ &\quad - \vartheta_j \cos(i+1)ja \} \sin jk\omega, \\ A II_{ik}^{(ij)} &= \{ (x^2 - x - \vartheta_j) \cos ija + (1-x) \cos(i+1)ja \} \\ &\quad [\sin jk\omega + \sin j(k+1)\omega], \\ A III_{ik}^{(ij)} &= \{ (-x^2 + x + \vartheta_j) \cos(i+1)ja + (x-1) \cos ija \} \\ &\quad [\sin jk\omega + \sin j(k+1)\omega], \\ A IV_{ik}^{(ij)} &= \{ [-x^3 + x(1 + \vartheta_j) + x^2 - 1] \cos(i+1)ja + \\ &\quad + \vartheta_j \cos ija \} \sin jk\omega. \end{aligned} \right\} \quad (9c)$$

If the system of coefficients (8b) is symmetrical with respect to the a_1 -, a_2 -axes. 9b), however, is antisymmetrical with respect to them.

$$\left. \begin{aligned} S I_{ik} &= S IV_{n-1-i,k}, \\ S II_{ik} &= S III_{n-1-i,k}. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

$$\left. \begin{aligned} A I_{ik} &= -A IV_{n-1-i,k}, \\ A II_{ik} &= A III_{n-1-i,k}. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

In both systems of coefficients I_{i0} IV_{i0} $I_{\frac{n}{2}}$ $IV_{\frac{n}{2}}$ are zero because of factor $\sin jk\omega$ figuring in I and IV, thus the torus surface breaks up into rings each possessing C_n rotation symmetry.

The use of the symmetrical system of coefficients renders possible a further dissection of the ring into two configurations which agree as to their shape with the N -th member of the two-dimensional homologous series, the only difference being that the Coulomb integral of the atoms I and IV figuring in the first ($i = 0$) and in the last ($i = \frac{n}{2} - 1$) row is $\alpha + \beta$. In the antisymmetrical system of solutions the Coulomb integral is $\alpha - \beta$ in the same places, whereas in both cases the Coulomb integral of all the other atoms is α .

Thus, from the secular system of equations we obtain :

$$\left. \begin{aligned} i=0 \quad (\alpha - E) I_{0k} + \beta IV_{n-1,k} + \beta II_{0k} + \beta II_{0,k-1} &= 0, \\ \mu = \frac{n}{2} \quad (\alpha - E) I_{\mu-1,k} + \beta I_{\mu,k} + \beta III_{\mu-1,k} + \beta III_{\mu-1,k-1} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

From (10) and (11) :

$$\left. \begin{aligned} S I_{0k} &= S IV_{n-1,k}, \\ S I_{\mu k} &= S IV_{\mu-1,k}. \end{aligned} \right\} \quad (13) \quad \left. \begin{aligned} A I_{0k} &= - A IV_{n-1,k}, \\ A I_{\mu k} &= - A IV_{\mu-1,k}. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Substituting these into (12) the following equations are obtained :

$$\left. \begin{aligned} (\alpha + \beta - E) S I_{0k} + \beta S II_{0k} + \beta S II_{0,k-1} &= 0, \\ (\alpha + \beta - E) S IV_{\mu-1,k} + \beta S III_{\mu-1,k} + \beta S III_{\mu-1,k-1} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

$$\left. \begin{aligned} (\alpha - \beta - E) A I_{0k} + \beta A II_{0k} + \beta A II_{0,k-1} &= 0, \\ (\alpha - \beta - E) A IV_{\mu-1,k} + \beta A III_{\mu-1,k} + \beta A III_{\mu-1,k-1} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

All the other equations not mentioned here are identical with the original equations of the torus. However, it is evident that together with those mentioned here equations (15) and (16) correspond exactly to the secular equations of compounds possessing the above-mentioned properties.

Both configurations are symmetrical as to their shape in respect of the b_1 -, b_2 -axes, thus the system of coefficients must be symmetrical or antisymmetrical in respect of them. In a manner completely analogous to the procedure detailed above both configurations can be further dissected and finally the following 4 compounds are obtained (Fig. 5).

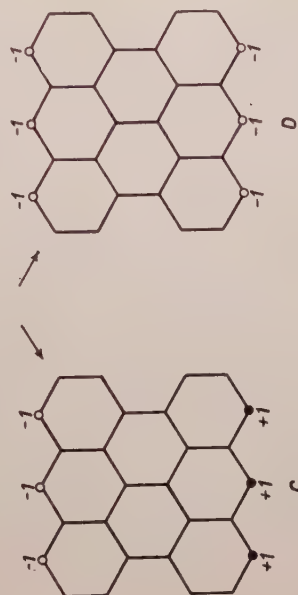
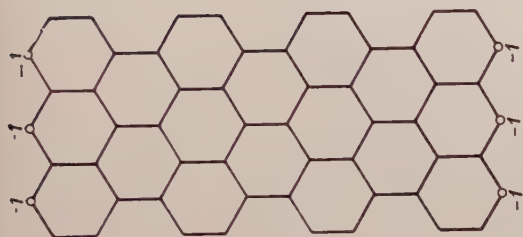


Fig. 5b

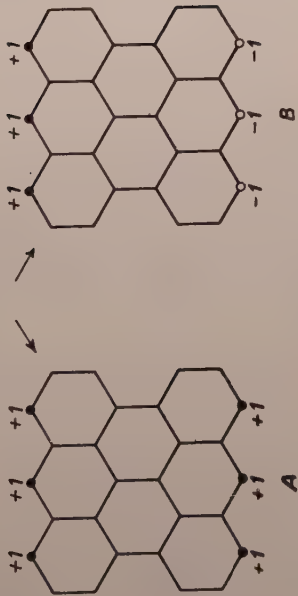
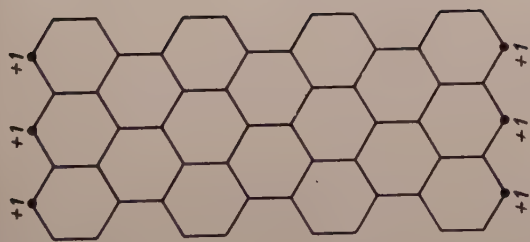


Fig. 5a

The atoms where the Coulomb integral is $\alpha + \beta$ are marked with $+1$ in the Figure, whereas those, where the Coulomb integral is $\alpha - \beta$ are marked with -1 . Corresponding to these atoms there will be $(-x+1)$ and $(-x-1)$ respectively in the diagonal places of the secular determinant after dividing each row of the determinant by β .

4. §. Application of perturbation calculation

According to the preceding paragraph the eigenvalues of the 4 compounds figuring in Fig. 5 can be obtained by HEILBRONNER's method. This result is useful in itself, but it further renders possible the determination of an approximate energy value for the members of the two-dimensional homologous series.

Let us consider A and B . Their eigenvalues can be approximated using matrix perturbation methods [9] and starting from the eigenvalues and eigenvectors of the compound E as follows: (Fig. 6)

$$\left. \begin{aligned} x_i^{(A)} &\sim x_i^{(E)} + \Delta' x_i^{(E)} + \dots, \\ x_i^{(B)} &\sim x_i^{(E)} - \Delta' x_i^{(E)} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

In a completely analogous manner the eigenvalues of C and D can be approximated using the eigenvalues and eigenvectors of compound F .

$$\left. \begin{aligned} x_i^{(C)} &\sim x_i^{(F)} + \delta' x_i^{(F)} + \dots, \\ x_i^{(D)} &\sim x_i^{(F)} - \delta' x_i^{(F)} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

If in the perturbation calculation second and higher order members can be neglected, the known eigenvalues of compounds A and B can be taken approximately equal with the first two members of the perturbation formula and the following approximate formulae are obtained for the eigenvalues of compounds E and F :

$$x_i^{(E)} \approx \frac{x_i^{(A)} + x_i^{(B)}}{2}, \quad x_i^{(F)} \approx \frac{x_i^{(C)} + x_i^{(D)}}{2}. \quad (3)$$

Repeating this step with reference to the compounds E and F , an approximate energy value can be obtained for the N -th member of the two-dimensional homologous series.

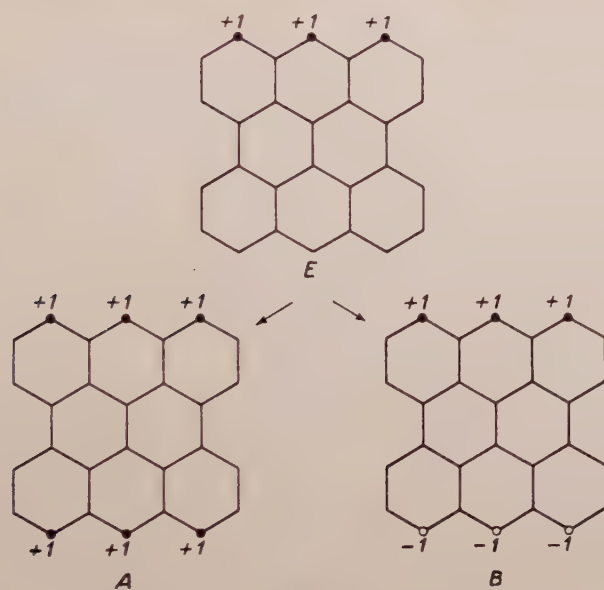


Fig. 6a

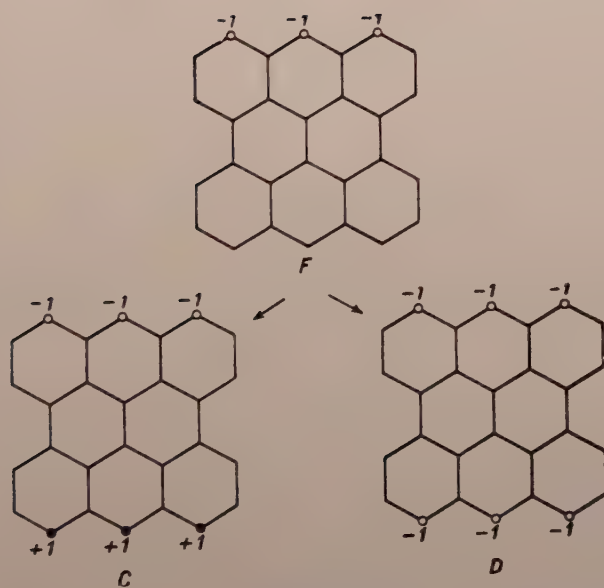


Fig. 6b

The better the higher order members can be neglected, the better results are furnished by the approximation

$$x_i \approx \frac{x_i^{(A)} + x_i^{(B)} + x_i^{(C)} + x_i^{(D)}}{4}. \quad (2)$$

The applicability of the approximation has been tested in several cases and the results obtained are reasonably good. The table below shows an illustrative calculation :

$$N = 2, \mathfrak{N} = 3$$

Table I

Results symmetrical to the <i>c</i> axis			Terrylene	
<i>A</i>	<i>D</i>	<i>B=C</i>	appr. (20)	exact
2,73205	2,64575	2,71036	2,69963	2,66142
2,64575	2,39416	2,53958	2,52976	2,45502
2,39416	2	2,21281	2,20494	2,12990
2	1,50597	1,76165	1,75732	1,71709
1,50597	1	1,24519	1,24909	1,27027
1	0,73205	0,80865	0,83734	0,88949
-0,73205	-1	-0,80865	-0,83734	-0,88949
-1	-1,50597	-1,24519	-1,24909	-1,27027
-1,50597	-2	-1,76165	-1,75732	-1,71709
-2	-2,39416	-2,21288	-2,20494	-2,12990
-2,39416	-2,64575	-2,53958	-2,52976	-2,45502
-2,64575	-2,73205	-2,71036	-2,69963	-2,66142

5. §. Classification of the solutions

For an application of the perturbation calculation it must be known to what compounds of *A — D* the roots (4) belong for given *j* and *j*. This problem can be answered by examining the respective systems of coefficients (8a and 9c).

In both systems of coefficients the same factor $\sin jk\omega$ and $[\sin jk\omega - \sin j(k+1)\omega]$ resp. figures in the atoms I, IV and II, III resp. Considering the properties of the sine function it is evident, that the solutions symmetrical to the *c*-axis of the molecule belong to even *j*, whereas the antisymmetrical belong to the odd *j*-s. This fact is of advantage when using the perturbation calculation insofar as we know that the approximate eigenvalues belong to solution with known symmetry properties with respect to the *c*-axis (vertical axis).

The assignment to compounds $A - D$ is determined by the value of j . In the system of solutions (8c) even j refers to the solution symmetrical to the b -axis, this belongs to the compound A , while odd j refers to the antisymmetrical solution (compound B). In the system of solution (9c) the situation is reserved: even j means a solution being antisymmetrical to the b -axis (compound D), while odd j refers to the symmetrical solution (compound C). These conclusions can be drawn from formulae (8b) and (9b) resp. using elementary trigonometrical relations. (b : horizontal axis).

Summarizing our results: even j belong to the compounds A and D while odd j refer to the eigenvalues of B and C (essentially identical compounds).

To divide up the eigenvalues of the compounds A and D among the even j , the fact can be used that the eigenvalues of compound D are the negatives of the eigenvalues of compound A . (The proof is given in the Appendix.) Taking into account the corresponding multiplicity of the roots each root occurs both with $+$ and with $-$ sign in both compounds except $j = 0$ and $j = \frac{n}{2}$. The separation need be accomplished only for the roots of these two j 's. Examining the corresponding quadratic forms, it is easy to prove that the greatest positive root belongs to compound A (its negative to D) and the least positive root to the D (its negative to A).

Special consideration must be given to the roots $+1$ and -1 . The solutions corresponding to them are obtained for $j = n/2$ [see formula (4)], however, the system of solutions (8c) and (9c) resp. cannot be used here because it would give zero for all coefficients. To determine the system of solutions belonging to $+1$ and -1 , we must return to the original secular equations, for $j = n/2$ these are as follows:

$$\begin{aligned} -I + IV \xi^{-i} &= 0, & x &= 1, \\ -II + III &= 0, & \varepsilon^{n/2} &= -1. \end{aligned} \quad (21)$$

From this the following system of solutions can be obtained:

$$\left. \begin{aligned} I_{ik} &= 0, \\ II_{ik} &= (-1)^k \cos i j \alpha, \\ III_{ik} &= (-1)^k \cos i j \alpha, \\ IV_{ik} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

By using matrix perturbation considerations [9] it can be shown that this system belongs to the $+1$ and -1 roots of compounds A and D , further that the same roots occur in the corresponding members of the two-dimensional homologous series as well. (A number of $+1$ and just the same number of -1 .)

As in this special case the roots of the four kinds of compounds agree with the eigenvalues of the corresponding member of the two-dimensional homologous series, we need not consider them separately when using the approximate formula.

I express my sincere gratitude to J. I. HORVÁTH, Director of the Institute, for reviewing the manuscript and to B. VASVÁRI for drawing the figures.

APPENDIX

To prove that the eigenvalues of compound D are the negatives of those of compound A we use the fact that these are alternant hydrocarbons, i. e. all the atoms can be divided into two classes (they are labelled with o and x) in such a manner that two atoms belonging to the same class are never neighbours. Let us assume that our assertion is correct, let x_i be one root of compound A and let us assume that $-x_i$ is the one root of compound D . Substituting these into equation (9c) it is at once evident that

$$\begin{aligned} \text{o} \quad \text{I}_{ik}(A) &= -\text{I}_{ik}(D), & \text{o} \quad \text{III}_{ik}(A) &= -\text{III}_{ik}(D), \\ \text{x} \quad \text{II}_{ik}(A) &= \text{II}_{ik}(D), & \text{x} \quad \text{IV}_{ik}(A) &= \text{IV}_{ik}(D). \end{aligned}$$

This means that the coefficients of atoms x are the same in both compounds, whereas the coefficients of atoms o are of opposite sign. Using this fact it follows from the equation below referring to the compound

$$A \left\{ \begin{aligned} -x_i C_{ik} + \sum_r C_{ir} &= 0, & C_i &= \text{I, II, III, IV,} \\ (-x + 1) C_{0k} + \sum_r C_{0r} &= 0, & r &\text{ is neighbouring to } k \end{aligned} \right.$$

that $(-x_i)$ really belongs to the secular equation of compound D

$$D \left\{ \begin{aligned} -(-x_i) C_{ik} + \sum_r (-C_{ir}) &= 0, \\ (-(-x_i) + 1) C_{0k} + \sum_r (-C_{0r}) &= 0. \end{aligned} \right.$$

REFERENCES

1. C. A. COULSON, Proc. Phys. Soc., London A, **60**, 257, 1948.
2. C. A. COULSON and G. S. RUSHBROKE, Proc. Camb. Phil. Soc., **44**, 272, 1948.
3. M. BRADBURN, C. A. COULSON and G. S. RUSHBROKE, Proc. Roy. Soc., Ed. A **62**, 336, 1948.
4. D. E. RUTHERFORD, Proc. Roy. Soc. Ed. A **62**, 229, 1947.
5. E. HEILBRONNER, Helv. Chim. Acta, **36**, 921, 1954.
6. R. PAUNCZ and F. BERENCZ, Acta Chim. Ac. Sci. Hung., **4**, 333, 1954.
7. R. PAUNCZ and I. WILHEIM, Acta Chim. Ac. Sci. Hung. (to be published).
8. T. A. HOFFMANN, Acta Phys. Hung., **2**, 97, 1952.
9. R. PAUNCZ, Acta Phys. Hung. (to be published).

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХМЕРНОГО ГОМОЛОГИЧЕСКОГО РЯДА
АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Р. ПАУНЦ

Резюме

Статья примыкает к исследованию Гейльброннера по двумерному гомологическому ряду ароматических соединений. Анализ по методу Гейльброннера показывает, что хотя этот метод и дает правильные результаты в случаях полиаценового ряда и квадратной сетки, то он в случае двумерного гомологического ряда дает неверные собственные значения элементов ряда. В этом случае вышеупомянутый метод дает собственные значения тех вариаций, у которых интеграл Кулона атомов самого верхнего и самого нижнего рядов молекулы отклоняется на $\pm \beta$ по сравнению с интегралом Кулона всех других атомов молекулы. Используя эти результаты, посредством рассуждений по исчислению пертурбации удастся получить приближенные значения энергии элементов двумерного гомологического ряда. Вычисленные таким способом значения дают удовлетворительное совпадение с вычисленными точным методом собственными значениями.



НЕЗЕРКАЛЬНОЕ ОТРАЖЕНИЕ ЗВУКА ТОНКИМИ ОГРАНИЧЕННЫМИ ПЛАСТИНКАМИ В ЖИДКОСТИ

Л. М. ЛЯМШЕВ

АКУСТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ, АКАДЕМИЯ НАУК СССР, МОСКВА

(Представлено 3. Дьюлаи. — Поступило 3. IX. 1955)

Излагается теория и результаты экспериментального исследования незеркального отражения тонких пластинок, в том числе обнаруженного нового вида незеркального отражения, обусловленного поперечными колебаниями сжатия пластинки. Показано, что в пластинке имеет место явление пространственно-частотного резонанса, благодаря которому существует тонкая структура незеркального отражения. В результате экспериментального исследования отражения звука тонкими пластинками на частоте 1 мегатерц с помощью лабораторной установки, обеспечивающей необходимую точность измерений, найдено, что теория удовлетворительно описывает явление.

Введение

Когда на пластинку падает звуковая волна пластинка совершает колебания. Вторичное излучение, обусловленное колебаниями пластинки, может привести к появлению дополнительного рассеяния звука.

Было обнаружено [1], что при наклонном падении звуковой волны на пластинку в области некоторого угла наблюдается сильное отражение в направлении, противоположном направлению падающей волны, так называемое незеркальное отражение. Экспериментально установлено, что обнаруженное незеркальное отражение обусловлено изгибными колебаниями пластинки и наблюдается в том случае, если фазовая скорость в падающей волне вдоль пластинки совпадает со скоростью свободных изгибных волн в пластинке, т. е. когда выполняется «условие совпадения» [2]. Направление незеркального отражения определяется из выражения:

$$\sin \Theta = \frac{c}{c_u} = \frac{\lambda}{\lambda_u}, \quad (1)$$

где c — скорость звука, λ — длина волны в жидкости.

c_u — скорость свободных изгибных волн, λ_u — длина изгибной волны пластинке.

Θ — угол между нормалью к пластинке и направлением волнового вектора в падающей волне в жидкости.

Сущность эффекта незеркального отражения сводится к следующему. Когда на пластинку (рис. 1) падает под углом звуковая волна, вдоль пластинки распространяется волна сжатия, которая вызывает изгибные колебания пластинки.

тинки распространяется «вынужденная» изгибная волна, фазовая скорость которой равна фазовой скорости в падающей волне вдоль пластинки. Вынужденная изгибная волна, отражаясь от краев пластинки, распространяется в противоположном направлении со скоростью свободной изгибной волны в пластинке. Когда звуковая волна падает на пластинку под критическим углом (1), амплитуда вынужденной, а, следовательно, и отраженной свободной волны возрастает. Пластика, совершая колебания, интенсивно излучает. Излучение, обусловленное свободной волной, отраженной от противоположного края пластинки регистрируется как незеркальное отражение.

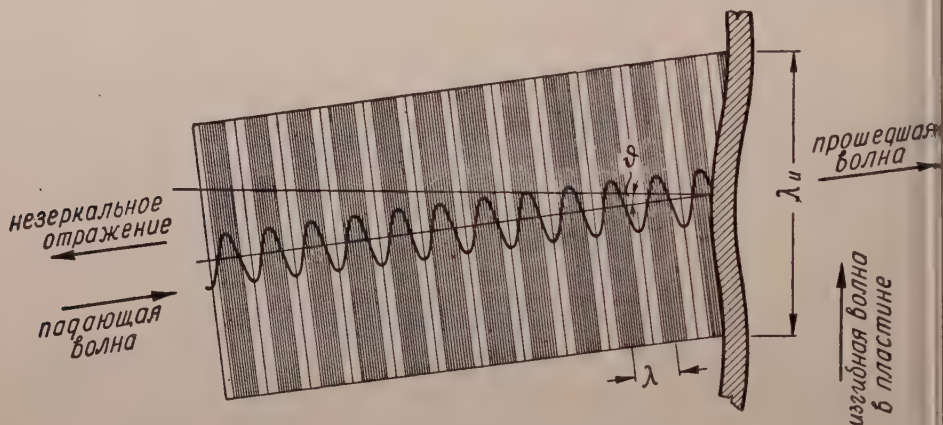


Рис. 1. Изгибный резонанс пластинки

Изучение эффекта незеркального отражения в работе [1] носило лишь качественный характер. Так эксперименты проводились только со стальными пластинками, погруженными в воду. Отражение исследовалось в зоне Френеля, при этом поле вдоль пластинки было неравномерно по амплитуде. Измерения проводились на низких ультразвуковых частотах 15—кгц. Строгой теории эффекта не было разработано. Нами были предприняты более широкие теоретические и экспериментальные исследования отражения звука тонкими ограниченными пластинками в воде.

В экспериментальных исследованиях использовалась импульсная методика измерений. Была сконструирована импульсная ультразвуковая установка, и изготовлены пластинки различной толщины и из различных материалов. В отличие от работы [1] измерения проводились на высоких ультразвуковых частотах (1 мгц) и исследовалось отражение в зоне Фраунгофера, причем поле падающей звуковой волны в пределах размеров пластинки было равномерным.

Исследуя подробно отражение звука тонкими ограниченными пластинками в направлении, противоположном падающей звуковой волны, м

обнаружили новый вид незеркального отражения, которое имело место для значительно меньших углов падения, чем незеркальное отражение, связанное с изгибными волнами [3]. Ю. М. Сухаревский указал на то, что новый вид незеркального отражения, вероятно, связан с возникновением в пластинке под действием падающей волны продольных волн, поскольку при углах, когда наблюдалось новое незеркальное отражение, фазовая скорость

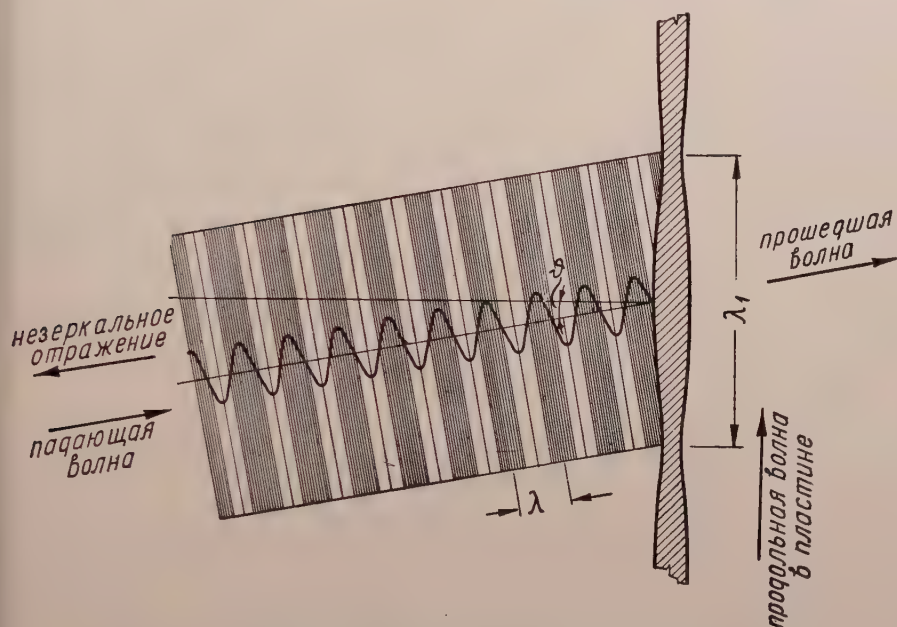


Рис. 2. Продольный резонанс пластинки

падающей волны в воде вдоль пластинки равна скорости продольных волн в пластинке. Им было высказано два предположения о механизме возбуждения падающей звуковой волной продольных волн в тонкой пластинке: во-первых, через поперечные сжатия пластинки, во-вторых, через вязкие волны в жидкости вблизи пластинки. Г. Д. Малюжинец показал, что одного первого механизма уже достаточно, чтобы описать наблюдаемое явление.

Как теперь выяснено, механизм нового вида незеркального отражения звука тонкой ограниченной пластинкой состоит в следующем. Когда на пластинку падает звуковая волна, вдоль пластинки распространяется вынужденная продольная волна, возбуждаемая падающей волной через поперечные сжатия пластинки (рис. 2). Вынужденная продольная волна, отражаясь от края пластинки, распространяется в противоположном направлении со скоростью свободной продольной волны в пластинке, излучая при

распространении часть своей энергии. Это излучение и регистрируется как незеркальное отражение. Максимум незеркального отражения наблюдается при таком угле падения звуковой волны на пластинку, когда фазовая скорость в падающей волне в жидкости вдоль пластинки совпадает со скоростью свободных продольных волн в пластинке. Значение критического угла определяется выражением:

$$\sin \Theta = \frac{c}{c_1} = \frac{\lambda}{\lambda_1}, \quad (2)$$

где c_1 — скорость продольных волн, λ_1 — длина продольной волны в пластинке.

В настоящей работе излагаются результаты детального теоретического и экспериментального исследования явления незеркального отражения. В первой теоретической части работы рассматривается задача о дифракции звука на тонкой ограниченной пластинке в жидкости с учетом колебаний пластинки. Во второй части излагаются результаты экспериментальных исследований, которые сравниваются с теоретическими данными.

Теория

а) Диффракция звука на тонкой ограниченной пластинке в жидкости

Вопросы, связанные с задачей дифракции звука на тонкой ограниченной пластинке в жидкости частично уже рассматривались [4, 5, 6]. Однако, авторы этих работ учитывали лишь изгибные колебания пластинки. В настоящей статье принимаются во внимание оба типа колебаний пластинки: изгибные колебания и поперечные колебания сжатия.*

Пусть на тонкую пластинку, закрепленную в неподвижном бесконечном экране и помещенную в жидкость падает в полупространстве $Z > 0$ под углом Θ плоская монохроматическая звуковая волна единичной амплитуды: $\exp [ik_x x - ik_z z]$

Здесь $k_x = k \cdot \sin \Theta$, $k_z = k \cdot \cos \Theta$ — составляющие волнового вектора падающей волны, Θ — угол между нормалью к пластинке направлением волнового вектора в падающей волне — угол падения. Фактор $\exp (-i\omega t)$ — опускаем.

Найдём волновые поля $p_1(x, z)$ и $p_2(x, z)$ в верхнем и нижнем полупространстве. Прямоугольную систему координат x, y, z выберем так как показано на рис. 3 и предположим, что пластинка бесконечная в направлении y занимает интервал $-d < \xi < d$ вдоль оси x .

* Поперечными колебаниями сжатия мы впредь будем называть поперечные колебания пластинки, связанные с продольными колебаниями пластинки через коэффициент Пуассона.

Скорость поперечных смещений поверхностей пластинки в случае изгибных или антисимметричных колебаний подчиняется уравнению движения [7].

$$g \frac{\partial^4 v}{\partial x^4} - \omega^2 m_s v = -i\omega (p_1 - p_2)_{z=0}, \quad (3)$$

а для поперечных колебаний сжатия или симметричных колебаний — уравнению движения [3]

$$c_1^2 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} + \omega^2 v_1 = -\frac{i\omega^3 a}{E_1} \left[(1 - \sigma_1^2) \frac{p_1 + p_2}{2} + \frac{1}{k_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{p_1 + p_2}{2} \right) \right] \quad (4)$$

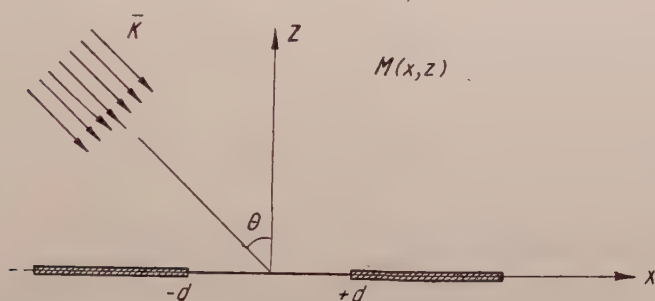


Рис. 3

при некоторых краевых условиях в точках $x = \pm d$. Для простоты будем считать эти условия самосопряженными.

В уравнениях (3) и (4) ρ_s — плотность материала пластинки, $2a$ — её толщина, E_1 — модуль Юнга, σ_1 — коэффициент Пуассона пластинки, c_1 — скорость продольных волн в пластинке, $m_s = 2a \rho_s$ — масса пластинки на единицу площади, $g = \frac{2}{3} E_1 a^3$ — цилиндрическая жёсткость пластинки.

Краевые условия на обеих поверхностях пластинки, а также требование погашаемости [8], могут быть удовлетворены, если искать решения волнового уравнения $\Delta p + k^2 p = 0$ в виде:

$$p_1(x, z) = \exp[ik_x x - ik_z z] + \exp[ik_x x + ik_z z] - \chi(x, z) - \chi_1(x, z); \quad (5)$$

$$p_2(x, -z) = +\chi(x, -z) - \chi_1(x, -z); \quad (6)$$

где

$$\chi(x, z) = \frac{\omega \rho}{4} \int_{-d}^{+d} v(\xi) H_0^{(1)}(kR) d\xi, \quad (7)$$

$$\chi_1(x, z) = \frac{\omega \rho}{4} \int_{-d}^{+d} v_1(\xi) H_0^{(1)}(kR) d\xi, \quad (8)$$

$$R = \sqrt{(x - \xi)^2 + z^2}. \quad (9)$$

Здесь ρ — плотность окружающей жидкости.

Таким образом, задача определения волновых полей p_1 и p_2 сводится к нахождению скорости поперечных смещений пластинки. Подставляя (7) (8) в (5), (6), а затем в (3) и (4), получим для скоростей смещений интегро-дифференциальные уравнения:

$$g \frac{\partial^4 v}{\partial x^4} - \omega^2 m_s v = -i\omega \left[2 \exp(ik_x x) - \frac{\omega \rho}{2} \int_{-d}^{+d} v(\xi) H_0^{(1)}(k\tau) d\xi \right], \quad (10)$$

$$c_1^2 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} + \omega^2 v_1 = -\frac{i\omega^3 a}{E_1} \left\{ (1 - \sigma_1^2) \left[\exp(ik_x x) - \frac{\omega \rho}{4} \int_{-d}^{+d} v_1(\xi) H_0^{(1)}(k\tau) d\xi \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{k_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\exp(ik_x x) - \frac{\omega \rho}{4} \int_{-d}^{+d} v_1(\xi) H_0^{(1)}(k\tau) d\xi \right] \right\}. \quad (11)$$

где

$$\tau = |x - \xi|, \quad (12)$$

Решение интегродифференциальных уравнений можно свести к решению линейных алгебраических уравнений, если разложить скорости смещений и давления в ряды по собственным функциям колебаний пластинки в вакууме.

Пусть $\psi_n(x)$ и $\psi_{(1)n}(x)$ нормированные собственные функции, удовлетворяющие уравнениям:

$$g \frac{\partial^4 \psi_n(x)}{\partial x^4} - \omega_n^2 m_s \psi_n(x) = 0, \quad (13)$$

$$C_1^2 \frac{\partial^2 \psi_{(1)n}(x)}{\partial x^2} + \omega_{(1)n}^2 \psi_{(1)n}(x) = 0 \quad (14)$$

и соответствующим выбранным краевым условиям. Здесь ω_n и $\omega_{(1)n}$ — собственные частоты изгибных колебаний и поперечных колебаний сжатия пластинки в вакууме.

Разложим скорости смещений поверхностей пластинки и давления, действующие на пластинку в ряды по собственным функциям колебаний

пластинки в вакууме $\psi_n(x)$ и $\psi_{(1)n}(x)$. Тогда имеем :

$$v(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \psi_n(x), \quad (15)$$

$$v_1(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_{(1)n} \psi_{(1)n}(x), \quad (16)$$

$$2 \exp(ik_x x) = \sum_{n=1}^{\infty} G_n \psi_n(x), \quad (17)$$

$$\exp(ik_x x) = \sum_{n=1}^{\infty} G_{(1)n} \psi_{(1)n}(x), \quad (18)$$

де

$$G_n = 2 \int_{-d}^{+d} \psi_n(x) \exp[ik_x x] dx, \quad (19)$$

$$G_{(1)n} = \int_{-d}^{+d} \psi_{(1)n}(x) \exp[ik_x x] dx. \quad (20)$$

Подставляя (15), (16), (17) и (18) в (10) и (11) можно переписать уравнения движения пластинки в таком виде :

$$\sum_{n=1}^{\infty} m_s (\omega_n^2 - \omega^2) b_n \psi_n(x) = -i\omega \left[\sum_{n=1}^{\infty} G_n \psi_n(x) - 2 \sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{\omega \varrho}{4} \times \right. \\ \left. \times \int_{-d}^{+d} \psi_n(\xi) H_0^{(1)}(k\tau) d\xi \right], \quad (21)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} (\omega_{(1)n}^2 - \omega^2) b_{(1)n} \psi_{(1)n}(x) = \frac{i\omega^3 a \left(1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2} \right)}{E_1} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} G_{(1)n} \psi_{(1)n}(x) - \right. \\ \left. - \sum_{n=1}^{\infty} b_{(1)n} \cdot \frac{\omega \varrho}{4 \left(1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2} \right)} \cdot \left[(1 - \sigma_1^2) \int_{-d}^{+d} \psi_{(1)n}(\xi) H_0^{(1)}(k\tau) d\xi + \right. \right. \\ \left. \left. + \int_{-d}^{+d} \frac{\partial^2 \psi_{(1)n}(\xi)}{\partial \xi^2} \cdot H_0^{(1)}(k\tau) d\xi + H_0^{(1)}(k\tau) \frac{\partial \psi_{(1)n}(\xi)}{\partial \xi} \Big|_{-d}^{+d} \right] \right\}. \quad (22)$$

Разложим интегралы в правой части выражений (21), (22) в ряды по собственным функциям:

$$\begin{aligned} \frac{\omega \varrho}{4} \int_{-d}^{+d} \psi_n(x) H_0^{(1)}(k\tau) d\xi &= \sum_{k=1}^{\infty} Z_{kn}(\omega) \cdot \psi_k(x), \\ \frac{\omega \varrho}{4 \left(1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2}\right)} \cdot \left[(1 - \sigma_1^2) \int_{-d}^{+d} \psi_{(1)n}(\xi) H_0^{(1)}(k\tau) d\xi + \right. \\ \left. + \int_{-d}^{+d} \frac{\partial^2 \psi_{(1)n}(\xi)}{\partial \xi^2} \cdot H_0^{(1)}(k\tau) d\xi + \int_{-d}^{+d} \frac{\partial \psi_{(1)n}(\xi)}{\partial \xi} H_0^{(1)}(k\tau) d\xi \right] &= \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} Z_{(1)kn}(\omega) \psi_{(1)k}(x), \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} Z_{kn}(\omega) &= \frac{\omega \varrho}{4} \int_{-d}^{+d} \int_{-d}^{+d} \psi_n(\xi) \cdot \psi_k(x) H_0^{(1)}(k|x - \xi|) d\xi dx, \\ Z_{(1)kn}(\omega) &= \frac{\omega \varrho}{4 \left(1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2}\right)} \cdot \left[(1 - \sigma_1^2) \int_{-d}^{+d} \int_{-d}^{+d} \psi_{(1)n}(\xi) \psi_{(1)k}(x) H_0^{(1)}(k\tau) d\xi dx \right. \\ &+ \int_{-d}^{+d} \int_{-d}^{+d} \frac{\partial^2 \psi_{(1)n}(\xi)}{\partial \xi^2} \cdot \psi_{(1)k}(x) \cdot H_0^{(1)}(k\tau) d\xi dx + \int_{-d}^{+d} \int_{-d}^{+d} \frac{\partial \psi_{(1)n}(\xi)}{\partial \xi} \cdot \psi_{(1)k}(x) \times \\ &\quad \left. \times H_0^{(1)}(k\tau) dx \right]. \end{aligned} \quad (24)$$

Теперь подставляя (23), (24) в (21) и (22), а затем умножая обе части уравнений соответственно на $\psi_n'(x)$ и $\psi_{(1)n}(x)$ и интегрируя по x в пределах пластинки, получим:

$$\begin{aligned} m_s (\omega_n^2 - \omega^2) b_n &= -i\omega \left[G_n - 2 \sum_{k=1}^{\infty} b_k Z_{kn}(\omega) \right], \\ (\omega_{(1)n}^2 - \omega^2) b_{(1)n} &= \frac{i\omega^3 \left(1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2}\right) a}{E_1} \cdot \left[G_{(1)n} - \sum_{k=1}^{\infty} b_{(1)k} Z_{(1)kn}(\omega) \right] \end{aligned} \quad (25)$$

Уравнения (27) и (28) можно переписать так:

$$b_n \cdot Z_n = G_n - 2 \sum_{k=1}^{\infty} b_k Z_{kn}(\omega), \quad (29)$$

$$b_{(1)n} Z_{(1)n} = G_{(1)n} - \sum_{k=1}^{\infty} b_{(1)k} Z_{(1)kn}(\omega), \quad (30)$$

где

$$Z_n = i \frac{m_s}{\omega} (\omega_n^2 - \omega^2), \quad (31)$$

$$Z_{(1)n} = -i \frac{E_1}{\omega^3 \left[1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2} \right] a} \cdot (\omega_{(1)n}^2 - \omega^2). \quad (32)$$

Коэффициентам разложения b_n , $b_{(1)n}$, G_n и $G_{(1)n}$, можно придать некоторый физический смысл. Будем называть эти коэффициенты «амплитудами». Тогда b_n и $b_{(1)n}$ можно рассматривать как амплитуды скорости антисимметричных и симметричных нормальных смещений собственных колебаний номера n , а G_n и $G_{(1)n}$ — как амплитуды давления собственных колебаний этого номера. Другими словами, если падающая волна представляет собой сумму парциальных волн, то G_n и $G_{(1)n}$ можно рассматривать как амплитуды давлений, b_n и $b_{(1)n}$ скорости нормальных смещений в парциальных волнах номера n на границе пластинки с жидкостью. В свете выше сказанного Z_n , $Z_{(1)n}$, Z_{kn} и $Z_{(1)kn}$ преобретают смысл импеданцев. Z_n и $Z_{(1)n}$ это импеданцы пластинки для собственных колебаний номера n , Z_{kn} и $Z_{(1)kn}$ — импеданцы излучения, причем $Z_{nn}(\omega)$ и $Z_{(1)nn}(\omega)$ — импеданцы излучения для собственных колебаний номера n , а Z_{kn} и $Z_{(1)kn}$ взаимные импеданцы излучения, характеризующие взаимосвязь между собственными колебаниями номеров n и k . Далее, $\sum_{k=1}^{\infty} b_k Z_{kn}$ и $\sum_{k=1}^{\infty} b_{(1)k} Z_{(1)kn}$ — есть давления, действующие на пластинку со стороны жидкости, при собственных колебаниях номера n и, следовательно, взаимные импеданцы Z_{kn} и $Z_{(1)kn}$ характеризуют собой давления, действующие на пластинку, совершающую колебания номера n , со стороны собственных колебаний номера k при единичной скорости нормальных смещений в колебаниях этого номера. Можно выделить в выражениях $\sum_{k=1}^{\infty} b_k Z_{kn}$ и $\sum_{k=1}^{\infty} b_{(1)k} Z_{(1)kn}$ члены с номером $k=n$, т. е.

$$\sum_{k=1}^{\infty} b_k Z_{kn} = b_n Z_{nn} + \sum' b_k Z_{kn}, \quad (33)$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} b_{(1)k} Z_{(1)kn} = b_{(1)n} Z_{(1)nn} + \sum' b_{(1)k} Z_{(1)kn}. \quad (34)$$

Если размеры пластинки велики по сравнению с длиной волны в жидкости и, если практически возбуждаются лишь собственные колебания относительно высоких номеров — взаимодействием между собственными колебаниями можно пренебречь [9].

Тогда

$$\Sigma' b_k Z_{kn} \rightarrow 0, \quad \Sigma' b_{(1)k} Z_{(1)kn} \rightarrow 0. \quad (35)$$

Подставляя (35) в (33) и (34), получим для коэффициентов приближенные выражения

$$b_n \approx \frac{G_n}{Z_n + 2Z_{nn}}, \quad (36)$$

$$b_{(1)n} \approx \frac{G_{(1)n}}{Z_{(1)n} + Z_{(1)nn}}. \quad (37)$$

Теперь можно написать окончательные выражения для полей $\chi(x, z)$ и $\chi_1(x, z)$. Подставляя (36), (37) в (15), (16), а затем в (7) и (8), и пользуясь (19), (20), получим:

$$\chi(x, z) \approx \frac{\omega Q}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{Z_n + 2Z_{nn}} \int_{-d}^{+d} \psi_n(\xi') e^{ik_x \xi'} d\xi' \times \quad (38)$$

$$\times \int_{-d}^{+d} \psi_n(\xi) H_0^{(1)}(k \sqrt{(x - \xi)^2 + z^2}) d\xi,$$

$$\chi_1(x, z) \approx \frac{\omega Q}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{Z_{(1)n} + Z_{(1)nn}} \int_{-d}^{+d} \psi_{(1)n}(\xi') e^{ik_x \xi'} d\xi' \times \quad (39)$$

$$\times \int_{-d}^{+d} \psi_{(1)n}(\xi) H_0^{(1)}(k \sqrt{(x - \xi)^2 + z^2}) d\xi.$$

Вычисления интегралов (38) и (39) проще всего выполнить в частном случае шарнирно закрепленной пластинки. В этом случае собственные функции имеют вид

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{d}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n x}{d}\right); \quad \psi_{(1)n}(x) = \frac{1}{\sqrt{d}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n x}{d}\right); \quad (40)$$

Рассматривая поле на расстоянии $R \gg d$, можно положить:

$$H_0^{(1)}(kR) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi k R_0}} e^{i(kR_0 - \frac{\pi}{4})} e^{-i\alpha_x \xi}, \quad (41)$$

$$R_0 = \sqrt{x^2 + z^2}, \quad (41a)$$

$$\alpha_x = k \cdot \frac{x}{R_0} = k \cdot \sin \vartheta'. \quad (41b)$$

ϑ' — угол между нормалью к пластинке и направлением в точку наблюдения.

Тогда:

$$\chi(x, z) \approx \frac{i\omega\rho}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k R_0}} \cdot e^{i(kR_0 - \frac{\pi}{4})} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega}{m_s} \frac{-2d}{\omega_n^2 - 2 \frac{i\omega}{m_s} Z_{nn} - \omega^2} \times \quad (42)$$

$$\times \left[\frac{\sin(\pi n + k_x d)}{\pi n + k_x d} - \frac{\sin(\pi n - k_x d)}{\pi n - k_x d} \right] \left[\frac{\sin(\pi n + \alpha_x d)}{\pi n + \alpha_x d} - \frac{\sin(\pi n - \alpha_x d)}{\pi n - \alpha_x d} \right],$$

$$\chi_1(x, z) \approx \frac{i\omega\rho}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k R_0}} \cdot e^{i(kR_0 - \frac{\pi}{4})} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a}{E_1} \times$$

$$\times \frac{\omega^3 \left(1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2} \right) d}{\omega_{(1)n}^2 + i\omega^3 \left(1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2} \right) \frac{a}{E_1} \cdot Z_{(1)nn} - \omega^2} \times \quad (43)$$

$$\times \left[\frac{\sin(\pi n + k_x d)}{\pi n + k_x d} - \frac{\sin(\pi n - k_x d)}{\pi n - k_x d} \right] \left[\frac{\sin(\pi n + \alpha_x d)}{\pi n + \alpha_x d} - \frac{\sin(\pi n - \alpha_x d)}{\pi n - \alpha_x d} \right].$$

Из выражений (42) и (43) видно, что часть волны рассеивается, а часть проходит через пластинку. Максимальное рассеяние и прохождение соответствует таким направлениям, когда $\omega = \omega_n$ или $\omega = \omega_{(1)n}$ и $|\pi n| = |k_x d| = |\alpha_x d|$. Значительная доля энергии звуковой волны рассеивается в направлении, противоположном направлению падающей волны. Это направление соответствует условию $\omega = \omega_n$ или $\omega = \omega_{(1)n}$ и $\pi n = k_x d = -\alpha_x d$; рассеяние в этом направлении получило название незеркального отражения [1, 3]. Таким образом, в отличие от абсолютно твёрдой неподвижной пла-

стинки, пластинка, способная совершать колебания, при некоторых углах падения звуковой волны не только рассеивает в зеркальном направлении, но и в направлении, противоположном направлению падающей волны, также пропускает часть звуковой энергии.

б) *Явление пространственно-частотного резонанса при рассеянии звука тонкой ограниченной пластинкой*

Рассмотрим подробнее выражения (42) и (43). Пусть нас интересует рассеяние в направлении, противоположном направлению падающей волны, т. е. так называемое незеркальное отражение. Тогда

$$k_x = -\alpha_x$$

и

$$|F_n(k_x)| = |F_n(\alpha_x)|,$$

где

$$F_n(k_x) = \frac{\sin(\pi n + k_x d)}{\pi n + k_x d} - \frac{\sin(\pi n - k_x d)}{\pi n - k_x d}, \quad (4)$$

$$F_n(\alpha_x) = \frac{\sin(\pi n + \alpha_x d)}{\pi n + \alpha_x d} - \frac{\sin(\pi n - \alpha_x d)}{\pi n - \alpha_x d}. \quad (4)$$

В случае, если n сравнительно велико* при $|\pi n| = |k_x d| = |\alpha_x d|$ коэффициенты F_n с точностью до знака равны единице, а при $|\pi(n \pm l)| \neq |k_x d| \neq |\alpha_x d|$, где $l = 1, 2, 3 \dots$ коэффициенты F_n практически равны нулю. Таким образом, все члены ряда, для которых $|\pi n| \neq |k_x d| = |\alpha_x d|$ равны нулю. И поле рассеяния при условии

$$|\pi n| = |k_x d| = |\alpha_x d|$$

* Здесь мы делаем то же предположение, что и выше, т. е. что в пластинке могут возбуждаться лишь собственные колебания высоких номеров, и, следовательно, собственные колебания низких номеров не играют роли в рассеянии звука.

описывается приближенно выражениями:

$$\chi(x, z) \approx \frac{i\omega\rho}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k R_0}} e^{i\left(kR_0 - \frac{\pi}{4}\right)} \frac{\omega}{m_s} \cdot \frac{-2d}{\omega_n^2 - 2 \frac{i\omega}{m_s} Z_{nn} - \omega^2}; \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \chi_1(x, z) \approx & \frac{i\omega\rho}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k R_0}} e^{i\left(kR_0 - \frac{\pi}{4}\right)} \cdot \frac{a}{E_1} \times \\ & \omega^3 \left(1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2}\right) d \times \\ & \times \frac{1}{\omega_{(1)n}^2 + i\omega^3 \frac{a}{E_1} \left(1 - \sigma_1^2 - \frac{k_x^2}{k_1^2}\right) Z_{(1)nn} - \omega^2}. \end{aligned} \quad (47)$$

величина $k_x = k \cdot \sin \Theta$ характеризует распределение давления в падающей волне вдоль пластинки и, следовательно, условие $|\pi k| = |2k_x d|$ показывает, что распределение давления в падающей волне совпадает с формой одного из собственных колебаний пластинки.** Амплитуда поля рассеяния, как видно из выражений (46) и (47) зависит также от собственной частоты возбуждаемого колебания пластинки ω_n или $\omega_{(1)n}$ и частоты падающей волны ω . Итак, можно констатировать, что амплитуда поля рассеяния зависит от распределения давления в падающей волне вдоль пластинки, т. е. от угла падения звуковой волны на пластинку и от частоты падающей волны. Отсюда видно, что при рассеянии звука ограниченной пластинкой наблюдается сложный пространственно-частотный резонанс. С одной стороны, имеет место пространственный резонанс-колебания в пластинке интенсивно возбуждаются всякий раз, когда распределение давления в падающей волне вдоль пластинки совпадает с формой одного из собственных колебаний пластинки, с другой стороны, наблюдается резонанс по частоте, так как амплитуда колебаний пластинки соответствует возбуждаемому собственному колебанию, а следовательно, амплитуда незеркального отражения зависит от того, насколько отличается собственная частота ω_n возбуждаемого колебания от частоты падающей волны ω . Максимальная амплитуда колебаний пластинки под действием падающей волны и максимальное рассеяние будут соответствовать случаю, когда имеет место двойной резонанс, т. е. одновременное совпадение распределения давления в падающей волне с формой одного из собственных колебаний пластинки и совпадение частоты падающей волны с частотой того собственного колебания.

** Под формой собственного колебания понимается распределение амплитуд колебания вдоль пластинки, описываемое одной из собственных функций: например, $\chi(x)$ см. С. П. Стрелков. Введение в теорию колебаний. ГИТТЛ. 1950, стр. 324.

Можно показать, что угол максимального рассеяния определяется выражениями :

$$\sin \vartheta = \frac{c}{c_u},$$

$$\sin \vartheta = \frac{c}{c_1}.$$

В самом деле, условия двойного резонанса можно записать так :

$$|\pi n| = |k_x d|, \quad \omega_n = \omega, \quad (4)$$

$$|\pi n| = |k_x d|, \quad \omega_{(1)n} = \omega. \quad (4)$$

Принимая во внимание, что

$$k \cdot \sin \vartheta = \frac{\omega}{c} \sin \vartheta, \quad (5)$$

$$\omega_n = \left[\frac{g}{m_s} \left(\frac{\pi n}{d} \right)^4 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

$$\omega_{(1)n} = c_1 \frac{\pi n}{d}, \quad (5)$$

а также, что скорость изгибных волн в пластинке определяется выражением

$$c_n = \left[\omega^2 \frac{g}{m_s} \right]^{\frac{1}{4}} \quad (5)$$

и, подставляя (51), (52), (53) в (48) и (49), получим выражения (1) и (2).

Чтобы определить амплитуду незеркального отражения, надо знать значения импеданцев излучения Z_{nn} и $Z_{(1)nn}$. Значения импеданцев Z_{nn} и $Z_{(1)nn}$ можно найти из выражения

$$Z_{nn} = \frac{\omega g}{4d} \int_{-d}^{+d} \int_{-d}^{+d} \sin \left(\frac{\pi n x}{d} \right) \sin \left(\frac{\pi n \xi}{d} \right) \cdot H_0^{(1)}(k/x - \xi) dx d\xi. \quad (5)$$

Для определения импеданцев излучения можно воспользоваться уже готовым результатом, полученным Гёзеле [10]. Гёзеле, рассматривая излу

ление ограниченной пластинкой, нормальная составляющая скорости вдоль которой распределена по закону стоячей волны $\left(\sin\left(\frac{\pi nx}{d}\right)\right)$, показал, что сопротивление излучения, т. е. действительная часть импеданса излучения, имеет вид:

$$R_u = 2\rho c \left[1 - \left(\frac{c}{c_u}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}}.$$

В случае пластинок больших размеров, по сравнению с длиной волны в жидкости, мнимой частью импеданса излучения можно пренебречь ввиду её малости по сравнению с действительной частью и в этом случае:

$$Z_{nn} \approx 2\rho c \left[1 - \left(\frac{c}{c_u}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}} = \frac{2\rho c}{\cos \vartheta_n}; \quad (55)$$

$$Z_{(1)nn} \approx 2\rho c \left[1 - \left(\frac{c}{c_1}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}} = \frac{2\rho c}{\cos \vartheta_1}. \quad (56)$$

Для максимального значения амплитуды незеркального отражения имеем из (46) и (47)

$$\chi_0(x, z) = \frac{\omega \rho}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k R_0}} e^{i\left(kR_0 - \frac{\pi}{4}\right)} \frac{d \cdot \cos \vartheta_n}{2\rho c}; \quad (57)$$

$$\chi_{10}(x, z) = \frac{\omega \rho}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k R_0}} e^{i\left(kR_0 - \frac{\pi}{4}\right)} \frac{d \cdot \cos \vartheta_1}{2\rho c}. \quad (58)$$

Оценим амплитуду отражения, обусловленного колебаниями пластинки для углов отличных от критического. Воспользовавшись выражениями: (46), (47) и (57), (58) получим: — в случае изгибных колебаний

$$\left|\frac{\chi}{\chi_0}\right| = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\cos \vartheta \cdot \omega m_s}{4\rho c}\right)^2 \left[1 - \left(\frac{c_u}{c} \sin \vartheta\right)^4\right]^2}}; \quad (59)$$

в случае поперечных колебаний сжатия имеем:

$$\left|\frac{\chi}{\chi_{01}}\right| = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{E_1 \cdot \cos \vartheta}{\sigma_1^2 \cdot \omega \cdot a \cdot 2\rho c}\right)^2 \left[1 - \left(\frac{c_1}{c} \sin \vartheta\right)^2\right]^2}}. \quad (60)$$

Представляет интерес сравнить амплитуду незеркального отражения в максимуме с отражением от пластинки при перпендикулярном падении звука. В случае перпендикулярного падения звука на абсолютно жесткую пластинку давление в отраженной волне равно

$$P_0 = \frac{\omega \varrho}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k R_0}} \frac{2d}{\varrho c}. \quad (6)$$

Из выражений (57), (58) и (61) имеем :

$$\left| \frac{\chi_0}{P_0} \right| = \left| \frac{\chi_{10}}{P_0} \right| = \frac{\cos \vartheta}{4}; \quad (6)$$

Таким образом, в случае тонкой пластинки амплитуда незеркального отражения составляет $\frac{\cos \vartheta}{4}$ амплитуды отражения от абсолютно жесткой пластинки аналогичных размеров при перпендикулярном падении.

в) «Тонкая структура» незеркального отражения

Выражения (46) и (47), а, следовательно, и выражения (59) и (60) правильно описывают поле рассеяния лишь для таких углов падения звуковой волны на пластинку, для которых выполняется условие пространственного резонанса, т. е. $|\pi n| = |k_x d|$, где

$$k_x = k \cdot \sin \vartheta.$$

В случае, когда условие пространственного резонанса не выполняется, т. е.

$$|\pi n| \neq |k_x d|$$

и коэффициенты F_n в выражениях (46), (47) стремятся к нулю при больших n , колебания пластинки будут весьма малыми и амплитуда незеркального отражения также окажется незначительной.

Таким образом, в зависимости от угла падения звуковой волны на пластинку в области угла, соответствующего максимуму незеркального отражения, должны наблюдаться максимумы и минимумы отражения представляющие собой тонкую структуру незеркального отражения. Выражения (59) и (60) описывают огибающую максимумов тонкой структуры. В связи с явлением пространственно-частотного резонанса эту огибающую можно также рассматривать как резонансную кривую.

Следует заметить также, что выражения (59) и (60) описывают форму полярной характеристики пластинки в области углов незеркального отражения (1), (2).

В качестве характеристики тонкой структуры незеркального отражения можно принять ширину углового интервала между двумя соседними максимумами тонкой структуры. Можно показать, что ширина углового интервала $\Delta\Theta = \Theta_n - \Theta_{n\pm 1}$ определяется выражением:

$$\sin \vartheta_n - \sin \vartheta_{n\pm 1} = \frac{1}{n} \sin \vartheta_n, \quad (63)$$

где Θ_n и $\Theta_{n\pm 1}$ - углы падения, соответствующие максимумам тонкой структуры, обусловленным собственными колебаниями пластинки номера n и соседнего с ним номера $n \pm 1$ причем номер колебания, соответствующего максимуму незеркального отражения определяется из формулы:

$$n = \frac{d\omega \sin \Theta_n}{\pi c}. \quad (64)$$

г) «Длина пространственного установления колебаний» пластинки

Весьма важным в случае пространственно-частотного резонанса является вопрос о стационарности колебаний пластинки. В качестве критерия установления здесь наряду с временем установления можно принять длину пространственного установления колебаний.*

Смысл этого понятия заключается в следующем: если на тонкую полубезграничную пластинку под критическим углом падает звуковая волна, то амплитуда смещения пластинки у края оказывается неравной амплитуде смещения пластинки вдали от края. Вдоль пластинки устанавливается изгибная (или продольная) волна, амплитуда которой возрастает с удалением от края. Можно представить такую волну, как сумму вынужденной незатухающей волны и свободной волны, затухающей от края пластинки по экспоненциальному закону. Расстояние, на котором амплитуда свободной волны уменьшается в «е» раз, может быть принято в качестве длины пространственного установления.

Значения длины пространственного установления определяется выражениями:

для изгибных колебаний

$$l_u = \left[1 - \left(\frac{\lambda}{\lambda_u} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \frac{4 \cdot a \cdot \rho_s c_u}{\rho c}; \quad (65)$$

* Этот критерий введен по предложению Г. Д. Малюжинца.

для поперечных колебаний сжатия

$$l_1 = \left[1 - \left(\frac{\lambda}{\lambda_1} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \frac{E_1 \cdot c_1}{2\rho c \cdot \sigma_1^2 \cdot \omega^2 \cdot a}. \quad (6)$$

В таблице I приводятся значения длины пространственного установления для ряда пластинок в воде на частоте 10^6 герц.

Таблица I

Материал пластинки	Толщина пластинки	l_1 — для про- дольной волны	l_n — для из- гибной волны
сталь	1,1 мм.	80 см.	1,75 см.
сталь	0,8 мм.	105 см.	1,5 см.
латунь	0,8 мм.	11,5 см.	1,25 см.
латунь	0,6 мм.	15,5 см.	1,0 см.
алюминий	0,8 мм.	15,5 см.	0,5 см.
алюминий	1,1 мм.	11,5 см.	0,75 см.

д) Границы применимости теории

Сформулируем пределы применимости теории. Во-первых, теория справедлива для тонких пластинок, размеры которых велики по сравнению с длиной продольной волны в пластинке. Это следует из нашего предположения о том, что в пластинке могут возбуждаться лишь собственные колебания высоких номеров, когда взаимодействием между собственными колебаниями можно пренебречь.

Во-вторых, теория справедлива для пластинок, размеры которых малы (или, по крайней мере, равны) по сравнению с длиной пространственного установления колебаний в пластинке. В самом деле, колебания пластинок мы представляли в виде суммы её собственных колебаний, т. е. стоячих волн различной длины, кратных размерам пластинок. Между тем, если размеры пластинок окажутся существенно больше длины пространственного установления колебаний, стоячих волн в пластинке существовать не будет, так как бегущие свободные волны, отраженные от краев пластинок, будут затухать при распространении на расстоянии длины пространственного установления. В этом случае пластинка будет вести себя, с точки зрения незеркального отражения, как пластинка полубезграничная. Незеркальное отражение будет обусловлено колебаниями лишь противоположного конца пластинок, в то время как у пластинок малых размеров незеркальное отражение обусловлено колебаниями всей её поверхности. Амплитуда незер-

зеркального отражения будет уменьшаться по сравнению с амплитудой отражения при перпендикулярном падении, если размеры пластинки будут увеличиваться и возрастать до определённого значения, если размеры пластинки будут уменьшаться.

В-третьих, рассматривая задачу о рассеянии звука пластинкой мы считали, что на пластинку падает монохроматическая плоская звуковая волна. Между тем на практике часто приходится иметь дело с звуковыми импульсами (пакетами звуковых колебаний). Важно, поэтому, заметить, что теория будет справедлива тогда, когда пространственная длина звукового импульса будет больше или по крайней мере равна длине пространственного установления колебаний. В противном случае колебания пластинки окажутся неустановившимися, и амплитуда незеркального отражения будет незначительной.

Следует заметить, что все результаты, полученные выше, по отношению к полю рассеяния в направлении незеркального отражения справедливы и для направления зеркального рассеяния, а также и прошедшего через пластинку звука.

Сделаем теперь еще одно замечание. Говоря выше о явлении пространственно-частотного резонанса мы неявно полагаем, что собственные колебания пластинки в жидкости ортогональны. Явление пространственного резонанса с точки зрения ортогональности собственных колебаний пластинки состоит в том, что, когда распределение давления вдоль пластинки совпадает с одной из форм собственных колебаний, в пластинке возбуждается лишь собственное колебание данной формы, и из-за ортогональности действующей силы к другим собственным колебаниям, остальные собственные колебания в пластинке не возбуждаются.

В реальном случае пластинки, помещенной в жидкость, её собственные колебания частично неортогональны между собой. Всегда из-за наличия жидкости существует некоторая связь между собственными колебаниями пластинки. Картина пространственно-частотного резонанса усложняется.

Если добротность пластинки, как колебательной системы, очень велика, то небольшой неортогональности между собственными колебаниями достаточно, чтобы возбуждались те колебания, собственные частоты которых близки к частоте действующей силы, и хотя распределение действующей силы практически ортогонально к формам этих собственных колебаний, в пластинке будут существовать наряду с собственным колебанием, для которого выполняется условие пространственного резонанса, колебания других номеров.

В случае малой добротности системы взаимосвязь между собственными колебаниями может оказаться недостаточной, чтобы при выполнении условия пространственного резонанса другие собственные колебания возбуждались и тогда, действительно, практически возбуждается лишь одно соб-

ственное колебание пластинки. Это видно и из экспериментальных данных (см. ниже). В случае изгибных колебаний добротность мала и наблюдаются резкие минимумы и максимумы тонкой структуры (рис. 12). Для поперечных колебаний сжатия добротность велика, и тонкой структуры незеркального отражения не наблюдается, так как излучение, обусловленное собственными колебаниями соседними с резонансным «замазывает» минимумы тонкой структуры.

Экспериментальная часть

Экспериментальное исследование отражения звука пластинками проводилось на установке, блок-схема которой показана на рис. 4. Установка состояла из ванны размерами $2 \times 0,6 \times 0,6$ м³, наполненной дистиллированной водой, снабженной звукопоглощающим покрытием и координатным устройством (1), генератора ультразвуковых импульсов (2), приемного усилителя (3), ультразвукового вибратора (4) и индикаторного устройства (5). Генератор работал на частоте 10^6 герц. Длительность импульсов была 30 мксен, а частота следования импульсов 50 герц. Вибратором служила кварцевая пластинка полуволновой толщины χ -среза диаметром 20 мм. Приемный тракт состоял из резонансного усилителя, детектора и видеусилителя. Полоса пропускания и частотнофазовые характеристики тракта были таковы, что импульсы длительностью 30 мксек пропускались без заметных искажений. Индикатором служил импульсный осциллоскоп с ждущей разверткой. Амплитуда отраженного сигнала отсчитывалась по сетке на экране осциллоскопа.

Координатник ванны был снабжен рамой, в которой крепилась с помощью тонких нитей пластинка. Рама с пластинкой могла вращаться относительно своей оси. Точность отсчета угла поворота рамы была порядка $0,1^\circ$. Координатное устройство ванны давало возможность перемещать вибратор и пластинку в трёх взаимноперпендикулярных направлениях с точностью 0,1 мм.

Экспериментально исследовалось отражение в направлении, противоположном направлению падающей волны, так называемое незеркальное отражение. Для этого были изготовлены латунные, алюминиевые и стальные прямоугольные пластинки размерами 15×30 мм² различной толщины.

Схема измерений показана на рис. 5.

В процессе измерений пластинка, укрепленная в раме, устанавливалась на расстоянии 1,5—1,6 м от вибратора и затем вращалась относительно своей оси. При каждом повороте пластинки фиксировалась амплитуда отражения от пластинки, причем амплитуда отражения могла быть оценена с точностью до 10%. По полученным результатам строились полярные характеристики отражения пластинок.

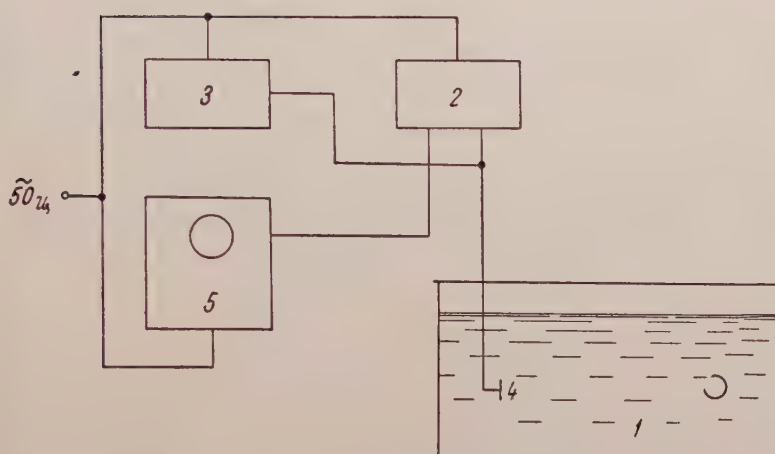


Рис. 4. Блок-схема установки



Рис. 5. Схема измерения незеркального отражения звука пластинкой
 Б — бассейн, В — ультразвуковой вибратор,
 П — пластинка, З. О. — зеркальное отражение,
 Н.О. — незеркальное отражение, θ — угол падения звуковой волны на пластинку

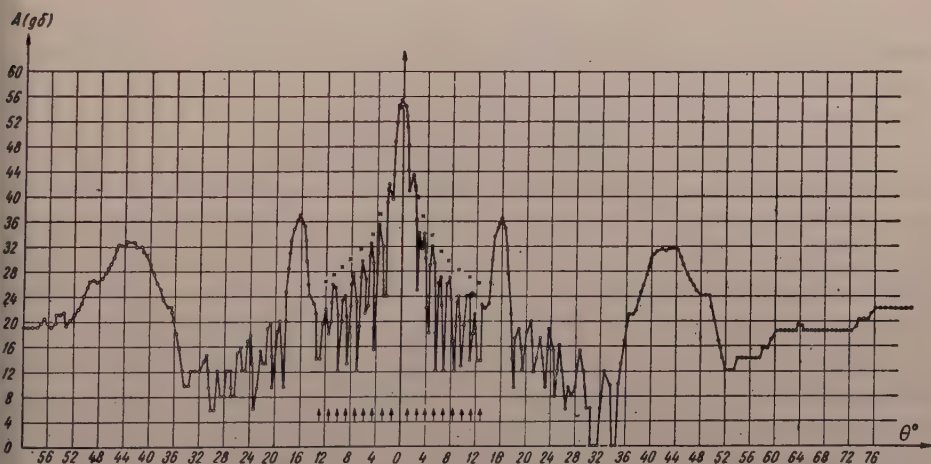


Рис. 6. Полярная характеристика алюминиевой пластинки размерами $15 \times 30 \text{ мм}^2$ и толщиной 0,8 мм

На приведенных ниже рисунках изображены полярные характеристики отражения различных пластинок. По вертикальной оси отложена амплитуда отражения в децибелах по отношению к произвольному уровню, по горизонтальной оси — угол падения звука на пластинку (угол поворота пластинки).

Из рисунков видно, что незеркальное отражение, соответствующее поперечным колебаниям сжатия имеет место для алюминиевой пластинки (рис. 6) и стальной пластинки (рис. 7) в области углов падения $\Theta = 15^\circ$.

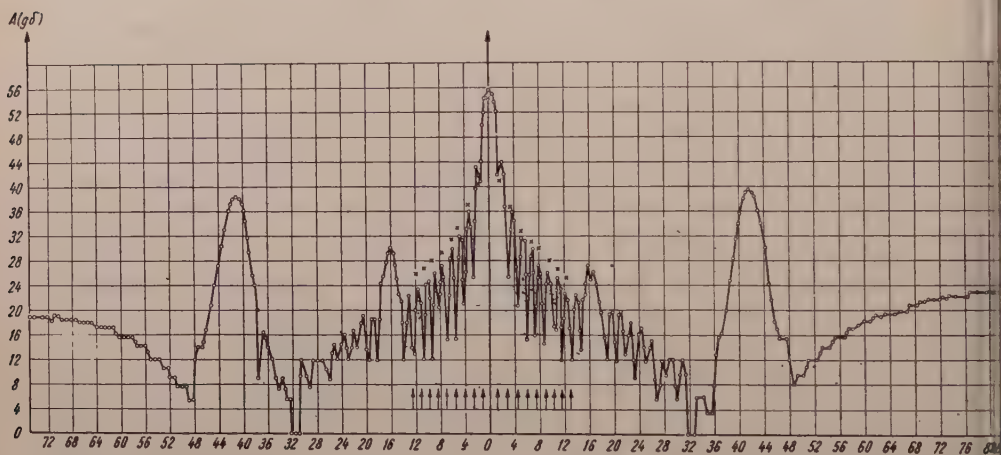


Рис. 7. Полярная характеристика стальной пластинки размерами $15 \times 30 \text{ мм}^2$ и толщиной 0,8 мм

а для латунных пластинок (рис. 8, 9, 10, 11) в области углов $\Theta = 23^\circ$. Углы, соответствующие максимуму наблюдаемого незеркального отражения для поперечных колебаний сжатия, точно равны вычисленным теоретическим по формуле (2).

Незеркальное отражение, обусловленное изгибными колебаниями пластинки, имеет место при различных углах падения в зависимости от толщины и материала пластинки. Так, для алюминиевой пластинки толщиной 0,8 мм оно наблюдается при угле падения $\Theta = 43^\circ$, для стальной пластинки толщиной 0,8 мм при угле падения $\Theta = 41^\circ$, для латунной пластинки толщиной 0,8 мм. и 0,6 мм. при угле $\Theta = 64^\circ$ и 68° . Так как скорость продольных волн в пластинке не зависит от толщины пластинки, то направление незеркального отражения не изменяется с изменением толщины пластинки. Наоборот, скорость изгибных волн увеличивается с увеличением толщины пластинки, что приводит при увеличении толщины пластинки к изменению направления незеркального отражения, обусловленного изгибными колебаниями в сторону меньших углов.

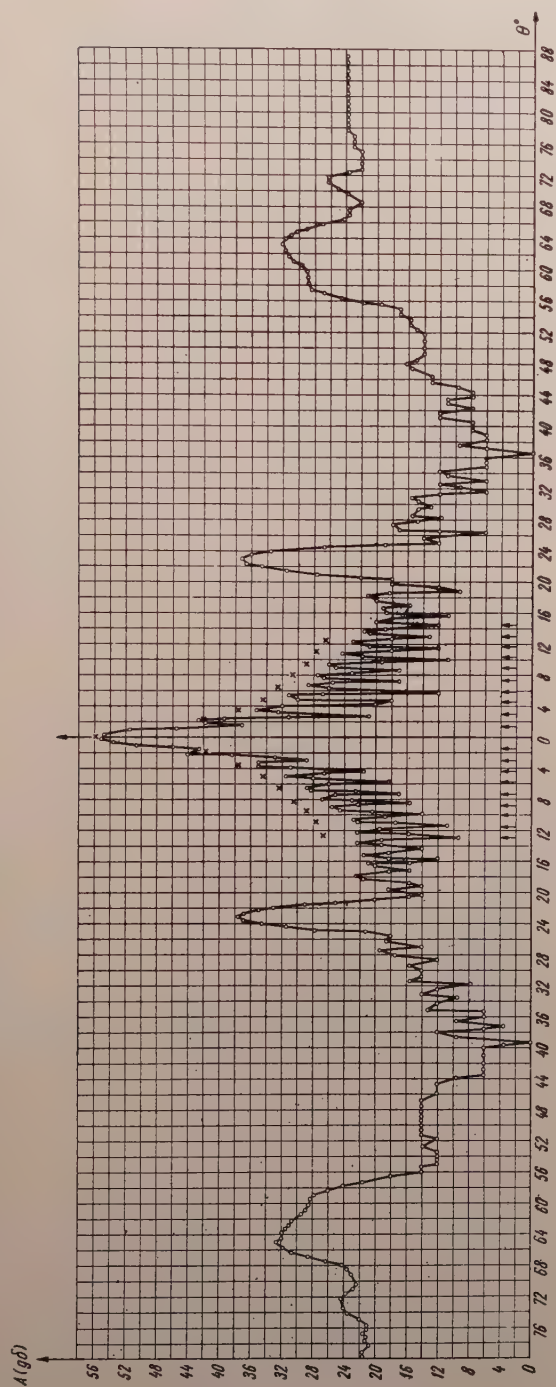


Рис. 8. Полярная характеристика латуной пластинки размерами $15 \times 30 \text{ мм}^2$ и толщиной 0,8 мм.

Следует заметить, что углы незеркального отражения, обусловленные изгибными колебаниями, не соответствуют углам, вычисленным теоретически по формулам (1) и (53). Это объясняется тем, что пластинки, с которыми проводились эксперименты, не являются достаточно тонкими, и в уравнении

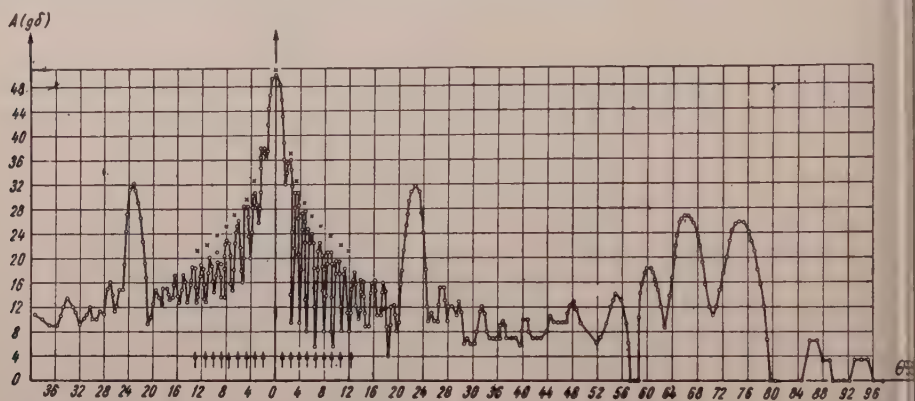


Рис. 9. Полярная характеристика латунной пластинки размерами $15 \times 30 \text{ мм}^2$ и толщиной $0,6 \text{ мм}$

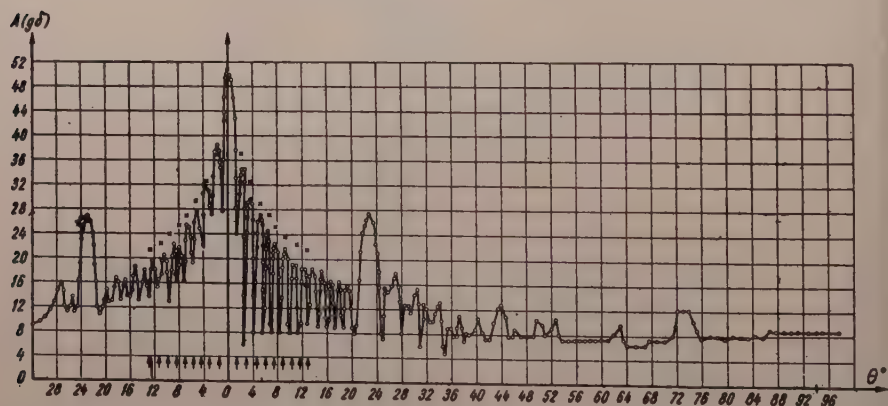


Рис. 10. Полярная характеристика латунной пластинки размерами $15 \times 30 \text{ мм}^2$ и толщиной $0,4 \text{ мм}$

движения пластинки, описывающее изгибные колебания, должны быть включены члены, учитывающие растяжение пластинки (при изгибе), сдвиг её элементов и поворот каждого элемента пластинки относительно своей оси инерции. Такие поправки были введены первоначально Релеем [11], а затем Тимошенко [12—13]. Как показывают расчеты, экспериментальные значения критических углов Θ_n хорошо совпадают с теоретическими, если учесть указанные поправки в уравнении движения [14].

В случае очень тонких пластинок, когда толщина пластинки такова, что длина изгибной волны в пластинке меньше длины звуковой волны в воде, незеркальное отражение, обусловленное изгибными колебаниями, не наблюдается, как и следует из теории (рис. 10, 11). Наконец, когда толщина пластинки становится еще меньше, амплитуда незеркального отражения, соответствующего поперечным колебаниям сжатия, падает, что видно, например, из сравнения незеркального отражения для латунных пластинок различной толщины (рис. 8, 9, 10, 11). Как следует из графиков

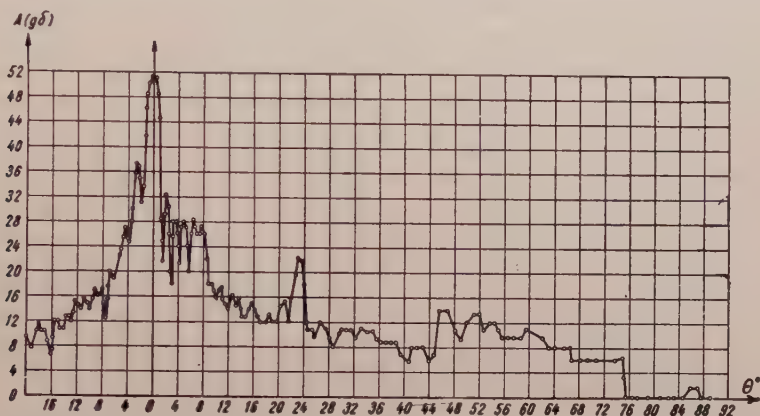


Рис. 11. Полярная характеристика латунной пластинки размерами 15×30 мм² и толщиной 0,1 мм

(рис. 8, 9, 10, 11) амплитуда незеркального отражения, обусловленного поперечными колебаниями сжатия, при уменьшении толщины пластинки в 2 раза, уменьшается почти на 10—12 дБ. Причины этого эффекта обсуждаются ниже.

Теоретически было показано, что отношение амплитуды незеркального отражения к амплитуде зеркального отражения при нормальном падении звуковой волны на полностью отражающую пластинку должно быть равным $\frac{\cos \vartheta}{4}$. С целью проверки этого вывода теоретические и экспериментальные значения амплитуды незеркального отражения сравнивались с амплитудой отражения при нормальном падении волны на пластинку. Эти результаты приведены в таблице II.

Как видно из данных таблицы II только в случае незеркального отражения, обусловленного изгибными колебаниями в стальных пластинках, имеет место удовлетворительное совпадение экспериментальных и теоретических данных. В других случаях экспериментальные амплитуды незеркального отражения на 4—5 дБ меньше теоретических значений, а в случае

незеркального отражения, обусловленного поперечными колебаниями сжатия, в стальных пластинках это различие составляет 13—14 дБ.

Таблица II

Материал пластинки и её толщи- на	Отношение амплитуды незеркального отражения (поперечные колебания сжатия) к амплитуде при норм. падении		Отношение амплитуды незеркальн. отражения (изгибные колебания) к амплитуде при нормаль- ном падении	
	Теор. дБ.	эксп. дБ.	Теор. дБ.	эксп. дБ.
Алюминий 0,8 мм.	—12,5	—18	—15	—23
Алюминий 1,1 мм.	—12,5	—16	—15	—22
Сталь 0,8 мм.	—12,5	—26	—15	—16
Сталь 1,1 мм.	—12,5	—24	—15	—16
Латунь 0,8 мм.	—13	—17	—19	—23
Латунь 0,6 мм.	—15	—17	—21	—24

Причины несоответствия теоретических и экспериментальных значений амплитуд незеркального отражения, имеющих место в ряде случаев, заключаются в следующем.

В теоретической части работы мы приводили значения длины пространственного установления для ряда пластинок, с которыми проводили опыты. Как видно из этих данных (таблица I), длина пространственного установления поперечных колебаний сжатия в стальных пластинках во всех случаях была существенно больше размеров пластинки, а длина ультразвукового импульса была значительно меньше длины пространственного установления колебаний. Так, например, для стальной пластинки толщиной 0,8 мм и длиной 30 мм, длина пространственного установления равна 105 см, в то время как длина импульса длительностью 30 мксек равна 45 мм. Значительное расхождение экспериментальных и теоретических значений амплитуды незеркального отражения стальных пластинок, обусловленного поперечными колебаниями сжатия, может найти свое объяснение, таким образом, в неустановившемся характере колебаний (в нестижении полной амплитуды колебаний пластинки за время импульса).

В случае латунных или алюминиевых пластинок, длина пространственного установления поперечных колебаний сжатия которых лишь в два-три раза больше пространственной длины импульса, соответственно, и различие

между теоретическими и экспериментальными значениями амплитуды незеркального отражения, как показывают данные таблицы II, не так велико, как для стальных пластин.

Для изгибных колебаний длина пространственного установления значительно меньше, чем для поперечных колебаний сжатия. Как видно из данных таблицы I требование по крайней мере равенства длины импульса длине пространственного установления для изгибных колебаний всегда выполнялось. Наоборот, требование малости размеров пластинки по сравнению с длиной пространственного установления не выполнялось. Длина пространственного установления пластинок была меньше длины пластинок. Однако, для стальных пластинок длина пространственного установления все же была сравнимой с размерами пластинки, чем можно объяснить то, что экспериментальные значения амплитуд незеркального отражения, обусловленного изгибными колебаниями не намного меньше теоретических значений (практически совпадают с ними). В случае же алюминиевых и титановых пластинок, для которых длина пространственного установления намного меньше размеров пластинки, как и следовало ожидать, теоретическое значение амплитуды незеркального отражения далеко не достигается. Как уже отмечалось выше, в создании незеркального отражения в этом случае участвует только край пластинки, у которого свободная изгибная волна еще сохраняет большую амплитуду.

В связи с вышеизложенным становится ясным, почему амплитуда незеркального отражения, обусловленного поперечными колебаниями сжатия, уменьшается при уменьшении толщины пластинки (рис. 9, 10, 11). С уменьшением толщины пластинки увеличивается длина пространственного установления и процесс колебаний оказывается неустановившимся.*

Следует сделать еще одно замечание относительно причин несоответствия теоретических и экспериментальных значений амплитуд незеркального отражения в пластинках с очень большой длиной пространственного установления (как, например, в стальных пластинках). Здесь может наблюдаться несоответствие экспериментальных и теоретических значений даже тогда, когда пространственная протяженность импульса больше длины пространственного установления. Так как у таких пластинок очень острый резонанс, при не очень больших размерах пластинки, кроме основной формы колебаний, существенное значение могут иметь лишь одна-две соседних формы колебаний. Поэтому, неточное соответствие длины пластинки условию двойного резонанса приводит к тому, что полной амплитуды незеркального отражения, соответствующей двойному резонансу получить не удастся.

* Другой возможной причиной уменьшения амплитуды незеркального отражения с уменьшением толщины пластинки могли бы быть потери в пластинке. Однако, расчеты показывают, что для выбранных пластинок потери практически не оказывают влияния на амплитуду незеркального отражения.

К этому же может приводить и неточность изготовления пластинки (непараллельность, неровность краев и т. д.), что вызывает частичное рассеяние не зеркального отражения в других направлениях.

Исследуя выше теоретическую угловую характеристику не зеркального отражения, мы нашли, что она должна представлять собой чередующийся ряд максимумов и минимумов, обусловленных явлением простран-

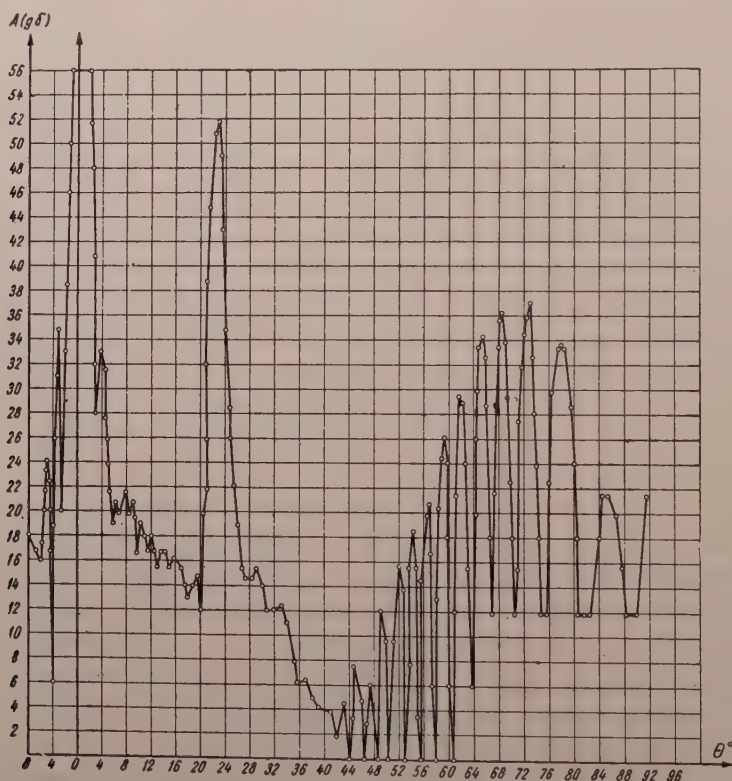


Рис. 12. Полярная характеристика латунной пластинки размерами $60 \times 60 \text{ мм}^2$ и толщиной 0,6 мм

ственно-частотного резонанса в пластинке. На рис. 12 показана полярная характеристика отражения латунной пластинки размерами $60 \times 60 \text{ мм}^2$ толщиной 0,6 мм. В диапазоне углов не зеркального отражения этой пластинки, обусловленного изгибными колебаниями, эффект пространственно-частотного резонанса четко выражен.

Выше было показано, что ширина углового интервала тонкой струны зависит от направления максимума не зеркального отражения, от номера формы колебаний пластинки, а также, что в области больших значений углов ($\theta = 70-90^\circ$) с изменением номера собственного колебания

Ширина углового интервала должна возрастать при увеличении Θ и уменьшаться при уменьшении Θ . Указанный характер изменения ширины углового интервала тонкой структуры незеркального отражения установлен и экспериментально. Из рис. 12 видно, что ширина максимумов тонкой структуры больше при $\Theta = 70-80^\circ$ и меньше при $\Theta = 40-50^\circ$. На рисунке 9 показана полярная характеристика отражения латунной пластинки толщиной 0,6 мм размерами $15 \times 30 \text{ мм}^2$, в которой также наблюдается тонкая структура незеркального отражения. Так как в этом случае размеры пластинки в два раза меньше чем в предыдущем, то номер собственного колебания, соответствующего углу незеркального отражения, должен быть в два раза меньше и ширина углового интервала должна быть в два раза больше чем в случае, представленном на рис. 12.

Таблица III

Ширина углового интервала тонкой структуры незеркального отражения для латунной пластинки длиной $2d = 60 \text{ мм}$, на частоте $f = 0,97 \cdot 10^6$ герц в воде

Номер собственного колебания	n	39	38	37	36	35	34	33	32	31	30	29
Теоретические результаты	Θ°	79	73	68,7	65,2	61,8	58,8	56,3	53,7	51,3	49	47
	$\Delta\Theta^\circ$	6	4,3	3,7	3,4	3	2,5	2,6	2,4	2,3	2	
Экспер. результаты	Θ°	78	73	68,9	65	62	59,5	57	54	52	49,5	47,5
	$\Delta\Theta^\circ$	5	4,1	3,9	3	2,5	2,5	3	2	2,5	2	

Таблица IV

Ширина углового интервала тонкой структуры незеркального отражения для латунной пластинки длиной $2d = 30 \text{ мм}$, на частоте $f = 0,97 \cdot 10^6$ герц в воде

Номер собственного колебания	n	20	19	18	17	16
Теоретич. результаты	Θ°	74	66	59,8	54,7	50,2
	$\Delta\Theta^\circ$	8	6,2	5,1	4,5	
Экспер. результаты	Θ°	74,5	66	60,5	55	48
	$\Delta\Theta^\circ$	8,5	5,5	5,5	7°	

Как видно из рис. 9 ширина углового интервала здесь вместо $3^\circ + 4^\circ$ действительно оказалась равной $6^\circ - 8^\circ$.

В таблицах III, IV, которые приводятся выше, сравниваются экспериментальные значения ширины углового интервала тонкой структуры (рис. 12 и 9) с теоретическими значениями.

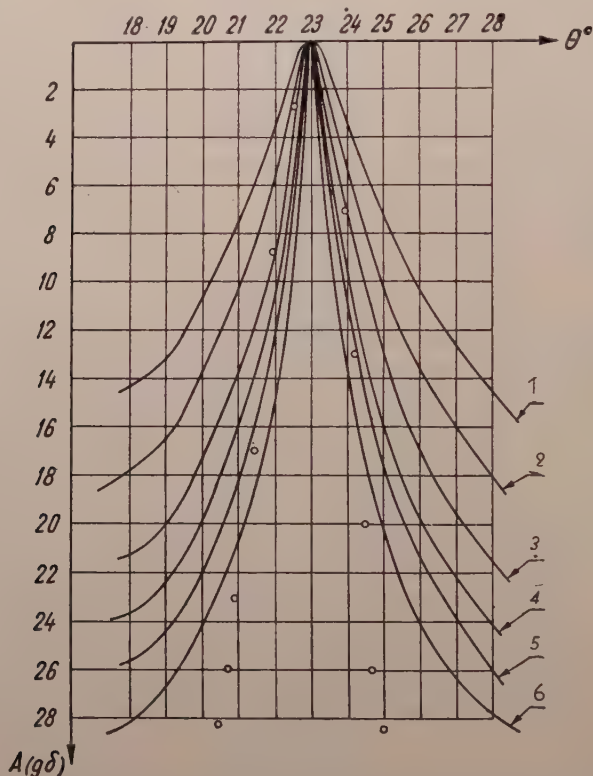


Рис. 13. Семейство «резонансных кривых» для поперечных колебаний сжатия в латунных пластинках различной толщины.

1. $2a = 2,4$ мм; 2. $2a = 2$ мм; 3. $2a = 1,4$ мм;
4. $2a = 1$ мм; 5. $2a = 0,8$ мм 6 $2a = 0,6$ мм.

Кружочками показаны экспериментальные значения амплитуды незеркального отражения, обусловленного поперечными колебаниями сжатия латунной пластинки толщиной 0,6 мм.

Из результатов, приведенных в таблицах III и IV, видно, что ширина углового интервала тонкой структуры увеличивается с увеличением угла падения Θ и номером возбуждаемого собственного колебания пластинки, как это и следует из выражения (26), а также наблюдается удовлетворительное совпадение теоретических и экспериментальных значений ширины углового интервала тонкой структуры и направлений максимумов тонкой структуры.

Возвратимся вновь к одному замечанию общего характера. Говоря выше о явлении пространственно-частотного резонанса мы неявно полагали, что собственные колебания пластинки в жидкости ортогональны. Явление пространственного резонанса с точки зрения ортогональности собственных колебаний пластинки состоит в том, что, когда распределение давления вдоль пластинки совпадает с одной из форм собственных колебаний, в пластинке возбуждается лишь собственное колебание данной формы и из-за ортогональности действующей силы к другим собственным колебаниям, остальные собственные колебания в пластинке не возбуждаются.

В реальном случае пластинки, помещенной в жидкость, её собственные колебания частично неортогональны между собой. Всегда из-за наличия жидкости существует некоторая связь между собственными колебаниями пластинки. Картина пространственно-частотного резонанса усложняется.

Если добротность пластинки, как колебательной системы, очень велика, то небольшой неортогональности между собственными колебаниями достаточно, чтобы собственные колебания возбуждались, если частоты этих собственных колебаний близки к частоте действующей силы, хотя распределение действующей силы практически ортогонально к формам этих собственных колебаний. В пластинке будут существовать, наряду с собственным колебанием, для которого выполняется условие пространственного резонанса, колебания других номеров.

В случае малой добротности системы взаимосвязь между собственными колебаниями может оказаться недостаточной, чтобы при выполнении условия пространственного резонанса другие собственные колебания возбуждались, и тогда действительно возбуждается лишь одно собственное колебание пластинки. Это видно и из экспериментальных данных. В случае гибких колебаний добротность мала и наблюдаются резкие минимумы и максимумы тонкой структуры. Для поперечных колебаний сжатия добротность велика, тонкой структуры незеркального отражения не наблюдается, так как излучение, обусловленное собственными колебаниями близкими к резонансному, наблюдается в области минимумов тонкой структуры.

Представляет интерес сопоставить теоретическую огибающую незеркального отражения с экспериментальной зависимостью амплитуды незеркального отражения от угла падения звуковой волны на пластинку в области критических углов. На рисунке 13 приводится семейство «резонансных кривых» для поперечных колебаний сжатия в латунных пластинках различной толщины. Кривые рассчитаны по формуле (60) кружочками показаны экспериментальные значения амплитуды незеркального отражения, обусловленного поперечными колебаниями сжатия для латунной пластинки толщиной 0,6 мм, размерами 60×60 мм².

Как видно из представленных результатов наблюдается удовлетворительное совпадение теоретической и экспериментальной огибающей незер-

кального отражения. В случае незеркального отражения, обусловленного изгибными колебаниями пластинки, удовлетворительного совпадения между теоретической и экспериментальными значениями огибающей незеркального отражения может и не наблюдаться. Это объясняется тем, что пластинки, с которыми проводились эксперименты, не являются тонкими, и, как уже отмечалось, в уравнение движения для изгибных колебаний таких пластинок необходимо ввести дополнительные члены, учитывающие растяжение пластинки, сдвиг и вращение её элементов относительно своего центра инерции.

Заканчивая изложение экспериментальных результатов и их обсуждение, отметим, что на основании проведенного сравнения данных экспериментального исследования известного и обнаруженного нами нового вида незеркального отражения звука тонкими пластинками с развитой выше теорией, можно, как нам представляется, констатировать, что эта теория удовлетворительно описывает не только качественную сторону, но и основные количественные соотношения явлений незеркального отражения звука тонкими ограниченными пластинками.

Заключение

В заключение считаю своим долгом выразить глубокую благодарность доктору технических наук Ю. М. Сухаревскому, под руководством которого была выполнена настоящая работа, и доктору физико-математических наук Г. Д. Малюжинец, руководившему теоретической частью работы.

Автор глубоко признателен члену-корреспонденту АН СССР Л. М. Бреховских за ценные указания, интерес и внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. W. FINNEY, J. Acoust. Soc. Am., **20**, 626, 1948.
2. L. CREMER, Akustische Zeitschrift, **7**, 81, 1942.
3. Л. М. Лямшев, Доклады Академии Наук СССР, **99**, 719, 1954.
4. Г. Д. Малюжинец и Н. С. Агеева, Отчет Управления строительства Дворцов Советов (1946).
5. В. Г. Волков, Журнал технической физики, **23**, 853, 1953.
6. J. LOUNG, J. Acoust. Soc. Am., **26**, 485, 1954.
7. Ф. Морз, Колебания и звук, ГИТТЛ, Москва—Ленинград, 1949.
8. Г. Д. Малюжинец, Доклады Академии Наук СССР, **78**, 439, 1951.
9. M. LAX, J. Acoust. Soc. Am., **16**, 5, 1944.
10. J. GÖSELE, Acustica, No 3, 243, 1953.
11. Рэлей, Теория звука, том I, ГИТТЛ, Москва—Ленинград, 1940 г.
12. S. TIMOSHENKO, Phil. Mag., **43**, 125, 1922.
13. S. TIMOSHENKO, Phil. Mag., **43**, 225, 1922.
14. Л. М. Лямшев, Диссертация, Акустический Институт Академии Наук СССР, Москва, 1954 г.

NON-SPECULAR REFLECTION OF SOUND FROM THIN, BOUNDED PLATES
SUBMERGED IN A LIQUID

By

L. M. LIAMSHEV

The present paper describes the theory and the results of the experimental investigation of the non-specular reflection of sound, including a new type of non-specular reflection due to the transverse vibrations caused by the pressure exerted on the plates. It is shown that in the plates a spatial frequency resonance phenomenon takes place, giving rise to the fine structure of non-specular reflection. The experimental investigations carried out at 1 megacycle by means of a laboratory equipment providing the necessary accuracy of the measurement show that the theory describes the phenomenon in good agreement with experiment.



RELATIVISTIC EFFECTS IN THE THEORY OF THE α -PARTICLE

By

M. A. ZIEGLER and G. SZAMOSI

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS, BUDAPEST

(Presented by L. Jánossy. — Received 6. IX. 1955)

The present article deals with the determination of the binding energy of the α -particle by means of a variational method. The one-particle eigenfunctions involving the variational parameter are of the oscillator type. A real scalar meson field is responsible for the nuclear interaction. The article takes into consideration the latest results of classical relativistic dynamics, i. e. the repulsive and many-body forces. The values of g are found to be 7,36e and 31,4e. In the latter case the importance of the repulsive and manybody forces considerably increases.

The present article deals with the determination of the binding energy of the α -particle by means of a variational method taking into consideration relativistic effects. The meson field responsible for the nuclear interaction is assumed to be of the simplest type, i. e. to be scalar, neutral and static. Thus the field equation is

$$\square \Phi - \mu^2 \Phi = 4\pi g \varrho, \quad (1)$$

where Φ is a real, scalar field function, μ the reciprocal Compton wave-length of the π meson, g the mesonic charge and ϱ the nuclear number density built up of the wave-functions of the individual nucleons in the well known way.

Assuming a scalar interaction we have adopted a rather rough approximation which has already been used many times. However, the results obtained recently by several authors by means of classical relativistic mechanics account for the re-performance of the above calculations [1]. Parts of these results are valid for almost any sort of nuclear force field: for simplicity we will deal with a scalar field.

It can be shown that the relativistic potential energy in a scalar field is [1]

$$\Phi \rightarrow -g\Phi + \frac{g^2 \Phi^2}{2m_0 c^2}, \quad (2)$$

where m_0 is the rest mass of nucleons.

Thus the classical potential acting on a single nucleon moving in a system of n point-like nucleons is

$$\begin{aligned}
 W(r) = & \sum_{i=1}^n -g^2 \frac{e^{-\mu|r-r_i|}}{|r-r_i|} + \sum_{i=1}^n \frac{g^4}{2m_0 c^2} \frac{e^{-2\mu|r-r_i|}}{|r-r_i|^2} + \\
 & + \sum_{i,j}^n \frac{g^4}{2m_0 c^2} \frac{e^{-\mu|r-r_i|}}{|r-r_i|} \frac{e^{-\mu|r-r_j|}}{|r-r_j|}.
 \end{aligned} \quad (3)$$

As one can immediately state from this formula the relativistic treatment of the motion in a meson field leads — without any special assumption — to three-body forces. This is simply a consequence of the non-linearity of the potential given in equ. (2). In the following we intend to investigate to what extent the theory of the α -particle, which was previously worked out on the basis of scalar meson field hypotheses, will be influenced by the new two- and threebody repulsive interactions occurring in equ. (3). It should be noted that we assume the proton and neutron mass to be equal; at the same time we do not take into consideration the so-called effective mass, using thus a further approximation in our calculations.

I

Let us start from equ. (3), by means of which it is easy to form the binding energy

$$E = \int \Psi^* H \Psi d\tau \quad (4)$$

for any given number of nuclei. In the Hartree-Fock approximation the eigenfunction of the whole system has the form of

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) \dots \psi_1(x_i) \dots \psi_1(x_n) \\ \psi_2(x_1) \dots \psi_2(x_i) \dots \psi_2(x_n) \\ \vdots \\ \psi_n(x_1) \dots \psi_n(x_i) \dots \psi_n(x_n) \end{vmatrix}, \quad (5)$$

where x_i represents the space, spin and isotopic spin coordinates of the i -th particle. As is well known in the ground state of the α -particle the eigenfunctions of the four particles are symmetrical in their space coordinates, i. e. all the exchange terms in the expression for the energy vanish.

Thus we get for E :

$$E = T + V_1 + V_2 + V_3, \quad (5)$$

where

$$\begin{aligned} \Gamma &= -\frac{2\hbar^2}{m_0} \int \varphi^*(r_1) \Delta \varphi(r_1) d\tau_1, \\ \Gamma_1 &= -6g^2 \iint |\varphi(r_1)|^2 |\varphi(r_2)|^2 \frac{e^{-\mu|r_1-r_2|}}{|r_1-r_2|} d\tau_1 d\tau_2, \\ \Gamma_2 &= \frac{3g^4}{m_0 c^2} \iint |\varphi(r_1)|^2 |\varphi(r_2)|^2 \frac{e^{-2\mu|r_1-r_2|}}{|r_1-r_2|^2} d\tau_1 d\tau_2, \\ \Gamma_3 &= \frac{2g^4}{m_0 c^2} \iiint |\varphi(r_1)|^2 |\varphi(r_2)|^2 |\varphi(r_3)|^2 \frac{e^{-\mu|r_1-r_2|}}{|r_1-r_2|} \frac{e^{-\mu|r_1-r_3|}}{|r_1-r_3|} d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3; \end{aligned} \quad (6)$$

where $\varphi(r)$ represents the common space part of the wave-function of nucleons.

Let us consider $\varphi(r)$ in the form of an oscillator eigenfunction

$$\varphi(r) = B e^{-\alpha \mu^2 r^2}, \quad (7)$$

where α is the variational parameter. The expression for B obtained from the normalisation of the eigenfunctions is $B = \left(\frac{2\alpha\mu^2}{\pi} \right)^{3/4}$.

Introducing this form of φ in the equations (6), we get

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{6\hbar^2 \mu^2}{m} a, \\ \Gamma_1 &= -6\mu g^2 \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{a} - e^{\frac{1}{4a}} \left[1 - \Phi\left(\frac{1}{2\sqrt{a}}\right) \right] \right\}, \\ \Gamma_2 &= \frac{6\mu^2 g^4}{m_0 c^2} \left\{ a e^{\frac{1}{a}} \left[1 - \Phi\left(\frac{1}{\sqrt{a}}\right) \right] \right\}, \\ \Gamma_3 &= \frac{4\mu^2 g^4}{m_0 c^2} \left\{ a \left[e^{\frac{3}{4a}} \left(1 - \Phi\left(\frac{1}{4\sqrt{a}}\right) \right) - e^{\frac{1}{4a}} \left(1 - \Phi\left(\frac{1}{4\sqrt{a}}\right) \right) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} a^{\frac{3}{2}} e^{\frac{3}{16a}} [f_2(a) - f_1(a)] \right] \right\}, \end{aligned}$$

where

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

is the well known error-function and

$$f_1(a) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_0^{\infty} e^{-ax^2 - \frac{1}{2}ax} \Phi[\xi_1(x, a)] dx; \quad f_2(a) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_0^{\infty} e^{-ax^2 - \frac{3}{2}ax} \Phi[\xi_2(x, a)] dx.$$

Here

$$\xi_1(x, a) = \sqrt{\frac{3}{16a}} + \sqrt{\frac{a}{3}}x; \quad \xi_2(x, a) = \sqrt{\frac{3}{16a}} - \sqrt{\frac{a}{3}}x.$$

We have to find the α -value which makes the E function a minimum i. e. we have to do with a variational problem. Owing to the complicated form of E we have solved the problem by numerical integration. (In our calculations we have chosen the mass of the π meson $m_\pi = 276 m_e$, where m_e is the mass of the electron.)

II

Let us now consider the results of the calculation. For the sake of comparison we first carried out the calculations neglecting the relativistic effect (i. e. $c \rightarrow \infty$). The minimum of the binding energy (equ. 5) is then obtained in accordance with the empirical value, if $\alpha = 1,2$ and $g = 7,06 e$ (here e the electron charge). Adding the approximate value of the Coulomb energy hitherto neglected in our calculation to the binding energy, we get for the empirical value $E_{emp} = -32,2$ MeV.

In the relativistic case equ. (5) has a minimum for two values of α . This means, of course, that there are two different values of g yielding the real binding energy. These values are the following

$$\begin{array}{llll} E = -32,2 \text{ MeV} & \text{if} & \alpha = 1,1 & \text{and} & g = 7,36 e, \\ E = -32,5 \text{ MeV} & \text{if} & \alpha = 0,3 & \text{and} & g = 31,4 e. \end{array}$$

The results obtained have a very clear physical meaning.

For the small value of g the role of the repulsion and the positive three-body forces in the expression for the binding energy is in fact negligible, i. e. the values of α and g differ very slightly from those obtained by the non-relativistic method.

On the other hand if g is large, the importance of the repulsion and the three-body forces highly increases. In this case the range of the space part of the wave-functions is about 3,6-times as great as the one obtained with the small value of g .

The role of the single terms of expression (5) can be more easily surveyed with the aid of the following Table :

$\alpha = 1,1 \quad g = 7,36e$	$\alpha = 0,3 \quad g = 31,4e$
$T = 137,75 \text{ MeV}$	$T = 37,56 \text{ MeV}$
$V_1 = -184,48 \text{ MeV}$	$V_1 = -998,74 \text{ MeV}$
$V_2 = 9,49 \text{ MeV}$	$V_2 = 534,32 \text{ MeV}$
$V_3 = 5,04 \text{ MeV}$	$V_3 = 394,59 \text{ MeV}$

As one can see from the Table the ratio of the attractive and repulsive parts of the potential energy is in the first case 0,079 and in the second 0,930. This increase of the repulsive interaction seems to be very important in the interpretation of the energy saturation of heavy nuclei [2].

We are indebted to KLÁRA SEBESTYÉN for carrying out the numerical calculations.

REFERENCES

1. J. WERLE, Bull. Acad. Sci. Polon. III. 1, 281, 1953.
2. G. SZAMOSI and G. MARX, Acta Phys. Hung., 4, 219, 1954.
3. G. SZAMOSI (in the press).

РЕЛЯТИВИСТСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ α -ЧАСТИЦЫ

М. А. ЦИГЛЕР И Г. САМОШИ

Резюме

Определяется энергия связи α частицы методом вариации. Вариационный параметр содержится в осциляторных функциях одночастич. Взаимодействие осуществляется с помощью действительного скалярного мезонного поля. В статье учитываются новые достижения классической релятивистской динамики: силы многих тел и отталкивающие силы. Для значения « g » получается 7,36e и 31,4e. В последнем случае значительно увеличивается роль отталкивающих сил и сил многих тел.



DAS EMISSIONSSPEKTRUM DES BiO-MOLEKÜLS

Von

O. SCARI

SPEKTROSKOPISCHE ABTEILUNG DES ZENTRALFORSCHUNGSINSTITUTS FÜR PHYSIK DER UNGARISCHEN
AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN, BUDAPEST

(Vorgelegt von I. Kovács. — Eingegangen: 27. IX. 1955)

Im Emissionsspektrum des BiO-Moleküls wurden im nahen infraroten Spektralbereich zahlreiche bisher noch nicht beobachtete Banden photographiert. Es wurde eine neue Vibrationsanalyse durchgeführt, laut der die Wellenzahl der Bandenköpfe durch die Formel

$$\nu = 15\,182,91 + \left\{ 510,37 \left(v' + \frac{1}{2} \right) - 2,92 \left(v' + \frac{1}{2} \right)^2 \right\} - \left\{ 690,65 \left(v'' + \frac{1}{2} \right) - 3,85 \left(v'' + \frac{1}{2} \right)^2 \right\}$$

geliefert wird.

Einleitung

Die Spektralanalyse der Oxyde der in die Gruppe Vb des periodischen Systems gehörenden Elemente kann noch keineswegs als befriedigend bezeichnet werden. Mit dem NO-Molekül befassen sich auch in neuester Zeit zahlreiche Arbeiten, während über die homologen Moleküle PO, AsO, SbO und BiO kaum Veröffentlichungen erschienen. Besonders die lückenhafte Kenntnis der letzteren drei Moleküle lässt es als notwendig erscheinen, ihre Analyse zu ergänzen. Im Rahmen dieser Aufgabe soll zuerst das BiO-Molekül eingehender untersucht werden, wobei das weitere Ziel der vorliegenden Abhandlung darin besteht, die bisherige Vibrationsanalyse des Emissionsbandensystems des BiO-Moleküls zu überprüfen und so den Weg zur Rotationsanalyse vorzubereiten.

Über das dem BiO-Molekül zugeschriebene Spektrum veröffentlichten MECKE und GUILLERY [1] als erste Messergebnisse. GHOSH [2] regte die BiO-Banden in einem mit Wismutchlorid gespeisten elektrischen Bogen an und teilte sie in vier Systeme, die er alle dem BiO-Molekül zuschrieb. MORGAN [3] wies nach, dass GHOSH irrtümlicherweise auch BiCl-Banden als BiO-Banden aufgefasst hat. RAY [4] untersuchte das Spektrum des BiCl und stellte dabei auf Grund seiner Messungen fest, dass die von GHOSH analysierten Banden in ihrer überwiegenden Mehrzahl vom BiCl-Molekül emittiert werden. An den verbleibenden Banden führte SEN GUPTA [5] eine Vibrationsanalyse aus. Auf Grund der Versuchsverhältnisse sowie der Grösse der Vibrationskonstanten darf angenommen werden, dass die von SEN GUPTA analysierten Banden tatsächlich vom BiO-Molekül emittiert werden.

Das zahlenmässige Ergebnis der experimentellen Emissionsuntersuchungen von SEN GUPTA wird durch seine Bandenkopfformel wie folgt geliefert:

$$\nu = 15\,194,5 + \left\{ 500,0 \left(\nu' + \frac{1}{2} \right) - 3,10 \left(\nu' + \frac{1}{2} \right)^2 \right\} - \left\{ 702,1 \left(\nu'' + \frac{1}{2} \right) - 5,20 \left(\nu'' + \frac{1}{2} \right)^2 \right\}.$$

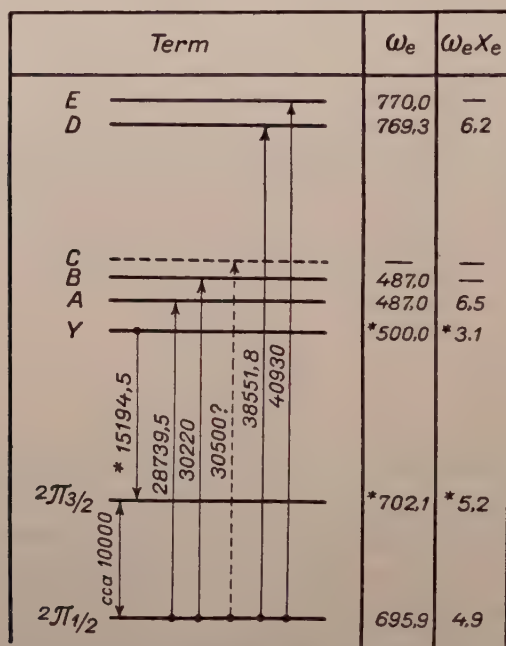


Abb. 1. Das Termschema des BiO nach BRIDGE und HOWELL. Die mit einem Stern bezeichneten Angaben sind die Messergebnisse von SEN GUPTA. Auf die Existenz des C-Terms weisen einige Banden hin, die sich nicht in die übrigen Systeme einreihen lassen.

Der Grundzustand der NO-, PO-, AsO- und SbO-Moleküle ist der $^2\Pi$ -Term. Obwohl beim AsO und SbO der $^2\Pi$ -Charakter des Grundzustandes noch nicht durch die Rotationsanalyse bestätigt wurde, zieht SEN GUPTA auch diese Moleküle zu der Folgerung heran, dass der Grundterm des BiO-Moleküls ebenfalls $^2\Pi$ ist. Aus der Extrapolation der bei den NO-, PO-, AsO- und SbO-Molekülen beobachteten Dublettaufspaltungen und aus den bei einigen anderen schweren Molekülen festgestellten Dublettaufspaltungen schätzt er die Aufspaltung des Grundterms des BiO-Moleküls auf 4000–4500 cm^{-1} . Aus dem einkantigen Aussehen der Emissionsbanden sowie aus dem $^2\Pi$ -Charakter des Grundzustandes gelangt SEN GUPTA zu dem Schluss, dass das Bandensystem aus dem Übergang $^2\Pi - ^2\Pi$ stammt, während er von den der anderen Komponente dieses Dublettüberganges zugeordneten Banden annimmt, dass sie sich im noch nicht erforschten nahen infraroten Spektralgebiet befinden müssen.

BRIDGE und HOWELL [6] untersuchten die Lichtabsorption des BiO-Moleküls und fanden dabei im ultravioletten Spektralbereich zahlreiche Absorptionsbanden. Sie reihten nun diese Banden in ihrem Matrizendiagramm in zwei Dublettsysteme ein, während diese Banden in ihrem Termschema als vier unabhängige Terme dargestellt sind (Abb. 1). Die Grundlage für ihr Termschema bildet die Annahme von SEN GUPTA, dass der Grundzustand ein $^2\Pi$ -System von grosser Aufspaltung ist. Sie identifizieren den unteren Zustand der in der Absorption wahrgenommenen BiO-Banden mit dem $^2\Pi_{1/2}$ -Grundzustand des BiO-Moleküls, während sie den unteren Zustand des Emissionssystems als obere $^2\Pi_{3/2}$ -Komponente des Dubletts ansehen. Sie finden, dass der für die Dublettaufspaltung des Grundterms von SEN GUPTA geschätzte Wert von $4000\text{--}4500\text{ cm}^{-1}$ zu gering ist, und schätzen auf Grund neuer Analogien die Dublettaufspaltung auf zumindest 8000 cm^{-1} . Wenn man die mit *A* und *Y* bezeichneten Terme, deren Vibrationskonstanten nicht allzu gut miteinander übereinstimmen, als identisch betrachtet, dann ergibt sich die Dublettaufspaltung des Grundzustandes zu $13\,500\text{ cm}^{-1}$. Sie schreiben die unbefriedigende Übereinstimmung der Vibrationskonstanten des *A*- und *Y*-Niveaus dem Umstand zu, dass diese aus einer ungenügenden Zahl von Banden bestimmt wurden. Dagegen sind sie gezwungen, das *A*- und *B*-Niveau sowie das *D*- und *E*-Niveau, deren Vibrationskonstanten paarweise übereinstimmen, als gesonderte Niveaus zu betrachten.

Das Ziel der vorliegenden Untersuchungen war festzustellen, ob es im infraroten Spektralbereich Banden gibt, die mit der Annahme von SEN GUPTA übereinstimmen, ferner zu entscheiden, ob die von BRIDGE und HOWELL mit *A* und *Y* bezeichneten Niveaus tatsächlich identisch sind.

Versuchseinrichtung

Zur Anregung der Emissionsbanden des BiO-Moleküls wurde in die Bohrung von spektralreiner Kohle Wismut gegossen. Die Gegenelektrode bestand ebenfalls aus Kohle. Als Lichtquelle wurde statt des von SEN GUPTA verwendeten Gleichstrombogens ein Hochfrequenzbogen benutzt. Zur Herstellung der Hochfrequenz diente ein Elektronenröhrenoszillator von 500 W Ausgangsleistung, der auf eine Frequenz von $3,75 \cdot 10^7\text{ Hz}$ abgestimmt war. Das Schaltschema ist aus Abb. 2 ersichtlich. Die Anregung mit Hilfe eines Hochfrequenzbogens bewährte sich besonders im infraroten Spektralbereich. Bei der Anregung mit einem Hochfrequenzbogen konnte der Grundsleier des Spektrums im Vergleich zur Anregung mit Gleichstrom vernachlässigt werden. Im infraroten Spektralbereich hätte der bei der Anregung mit Gleichstrom auftretende starke Schleier die Beobachtung der Banden besonders erschwert, da die kleine Dispersion des Spektrographen den kontinuierlichen Hintergrund gesteigert hervor-

hebt. Der Bogenstrom wurde so eingestellt, dass der Bogen stabil brannte und dass das in der Bohrung der Kohlenelektrode befindliche Bi infolge der sich entwickelnden Wärme noch nicht siedete. Um die Elektroden wurde ein Sauerstoffstrom von Atmosphärendruck geleitet und so erreicht, dass sich die Intensität der BiO-Banden im Vergleich zur Anregung an der Luft um etwa das Drei- bis Vierfache erhöhte, wobei zugleich auch die Intensität der Spektrallinien des Bi-Atoms bedeutend abnahm.

Die Aufnahmen wurden mit einem Spektrographen Typ ISzP 51 mit einer Glasoptik gemacht. Die Dispersion des Apparates beträgt

bei 5000 Å	47 Å/mm,
bei 6000 Å	87 Å/mm,
bei 7000 Å	149 Å/mm,
bei 8000 Å	196 Å/mm,

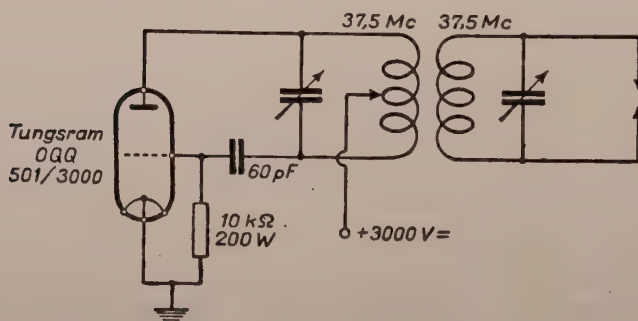


Abb. 2. Schaltschema des bei der Anregung des BiO verwendeten Radiofrequenzgenerators

seine wirksame relative Öffnung war 1 : 5,4. Alle Aufnahmen erfolgten auf den eine harte Gradation gebenden Photoemulsionen Agfa-Spektral-Blau-, -Gelb-, -Rot, Agfa-Infrarot 700, 750, 800 und 850. Die Belichtungszeit schwankte im sichtbaren Spektralbereich zwischen 10 und 100 sec, im infraroten Bereich zwischen 1 und 15 min. Die Bandenköpfe wurden mit einem Komparator der Marke Zeiss, ausgemessen. Der Messfehler beträgt im sichtbaren Spektralbereich weniger als 0,5 Å, im Infrarot weniger als 3 Å. Die Umrechnung auf die Wellenzahl wurde mit Hilfe der KAYSERSchen Tabelle durchgeführt.

Messergebnisse

Zwischen 5300 und 8300 Å wurden zahlreiche nach Rot abgeschattete einkantige Banden beobachtet, die nach den weiter unten angegebenen Ergebnissen der vom Verfasser durchgeführten Vibrationsanalyse sämtliche ein-

Tabelle I

BiO-Banden im Bereich von 5300—6700 Å

Nach den Messungen von SEN GUPTA	Nach eigenen Messungen	Auf Grund eigener Rotationsunter- suchungen berechnet
—	5296,2	
—	5426,9	5426,4
5563,9	5564,9	5564,8
5638,5	56,35—	
—	5661,—	
5712,1	5712,1	5712,1
5786,1	—	
5867,9	5869,2	5869,7
—	5833,2	
5943,5	—	
6022,3	6020,1	
6036,9	6037,7	6038,1
6116,7	—	
—	6164,3	
—	61,937	
6217,6	6218,6	6218,8
6299,3	6297,8	
6380,—	6378,5	
6411,7	6412,6	6412,5
6495,8	6495,—	
6583,—	—	
6621,5	6621,9	
6710,3	6708,—	

An den mit einem waagerechten Strich bezeichneten Stellen stehen keine Messergebnisse zur Verfügung.

einziges System bilden. Es wurde auch der Spektralbereich zwischen 8300 und 10000 Å untersucht, doch konnten dort keine Banden mehr festgestellt werden.

Die Tabelle I ermöglicht einen Vergleich zwischen den Wellenlängen der von SEN GUPTA und von uns gemessenen Bandenköpfe. Die in der letzten Spalte der Tabelle stehenden Wellenlängen wurden aus eben durchgeführten Rotationsanalysen berechnet.

Die Tabelle II gibt für sämtliche beobachtete Banden eine Zusammenstellung der Vibrationsquantenzahlen, der Wellenlängen der Bandenköpfe, der

Tabelle II
Die Emissionsbanden des BiO

$v'-v''$	λ (Å)	ν_{gemessen} (cm^{-1})	$\nu_{\text{berechnet}}$	$\nu_{\text{gemessen}} - \nu_{\text{berechnet}}$
10—0	5296,2	18876	18875,5	+ 0,5
9—0	5426,9	18422	18423,5	— 1,5
8—0	5564,5	17966	17965,7	+ 0,3
9—1	5635,—	17741	17740,6	+ 0,4
18—7	5661,—	17660	17662,1	— 2,1
7—0	5712,1	17502	17502,1	— 0,1
6—0	5869,2	17033	17032,6	+ 0,4
10—3	5933,2	16850	16849,8	+ 0,2
8—2	6020,1	16606	16607,5	— 1,5
5—0	6037,7	16558	16557,3	+ 0,7
16—8	6164,3	16218	16216,7	+ 1,3
7—2	6193,7	16141	16143,9	— 2,9
4—0	6218,6	16076	16076,1	— 0,1
5—1	6297,8	15874	15874,3	— 0,3
6—2	6378,5	15673	15674,4	— 1,4
3—0	6412,6	15590	15589,1	+ 0,9
4—1	6495,—	15392	15393,1	— 1,1
2—0	6621,—	15097	15096,3	+ 0,7
3—1	6708,—	14904	14906,1	2,1
7—4	6747,3	14817	14816,5	+ 0,5
1—0	6848,9	14597	14597,9	— 0,9
5—3	6879,—	14533	14531,5	+ 1,5
2—1	5936,5	14413	14413,3	— 0,3
3—2	7026,4	14228	14230,9	— 2,9
0—0	7093,5	14094	14093,—	+ 1,0
4—3	7115,2	14051	14050,3	+ 0,7
8—6	7157,—	13988	13983,5	+ 4,5
1—1	7184,—	13916	13914,6	+ 1,4
2—2	7277,3	13738	13738,—	0,0
0—1	7452,6	13414	13410,1	+ 3,9
1—2	7550,—	13421	13239,3	+ 1,7
3—4	7748,3	12903	12903,5	— 0,5
5—5	7845,—	12744	12738,3	+ 5,7
1—3	7950,2	12575	12571,8	+ 3,2
0—3	8282,7	12070	12067,3	+ 2,7

Tabelle III
Matrizendiagramm des Emissionsbandensystems des BiO

$v'' \backslash v'$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	14094 680 503	13414 502		12070 505					
1	14597 681 500	13916 675 497	13241 666 497	12575					
2	15097 684 493	14413 675 491	13738 490						
3	15590 686 486	14904 676 488	14228		12903				
4	16076 684 482	15392 482		14050 483					
5	16558 684 475	15874		14533		12744			
6	17033 469		15673 468						
7	17502 464		16141 465		14817				
8	17966 456		16606				13988		
9	18422 681 454	17741							
10	18876			16850					
11									
12									
13									
14									
15									16218
16									
17									
18								17680	

Vollenzahl sowie der Abweichung von der auf Grund der Messergebnisse aufgestellten Formel für die Bandenköpfe

$$v = 14\,182,91 + \left\{ 510,37 \left(v' + \frac{1}{2} \right) - 2,92 \left(v' + \frac{1}{2} \right)^2 \right\} - \left\{ 690,65 \left(v'' + \frac{1}{2} \right) - 3,85 \left(v'' + \frac{1}{2} \right)^2 \right\}.$$

Die Tabelle III enthält das Matrizendiagramm des Emissionsbandensystems von BiO. Die Entfernung der Vibrationsniveaus des unteren Zustands stimmt auffallend gut mit den Angaben der Absorptionsmessungen von BRIDGEMAN und HOWELL [6] überein.

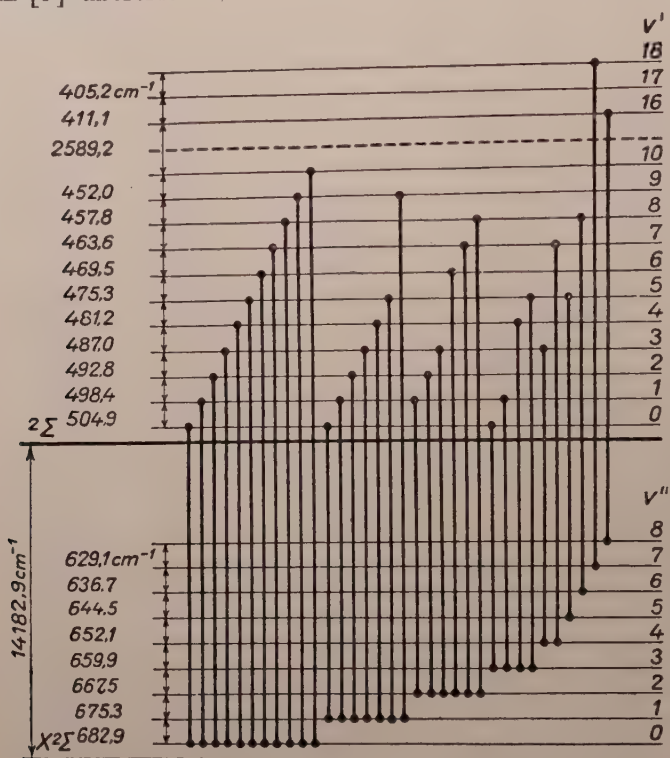


Abb. 3. Termschema des Emissionsbandensystems des BiO

Die Abb. 3 zeigt das Termschema des Emissionsbandensystems. Es ist beachtenswert, dass man im unteren Zustand auf dem Niveau

$$v = 0 \quad 11,$$

$$v = 1 \quad 7,$$

$$v = 2 \quad 6,$$

$$v = 3 \quad 4,$$

$$v = 4 \quad 2,$$

$v = 5, 6, 7$ und 8 je 1 Bande findet.

Diese regelmässige Abnahme der Zahl der Vibrationsniveaus mit der Erhöhung der Vibrationsquantenzahl weist darauf hin, dass der untere Zustand des Bandensystems zugleich auch der Grundzustand des BiO-Moleküls ist.

In Abb. 4 sind die positiven Vergrößerungen der von den Banden aufgenommenen Spektrogramme zu sehen.

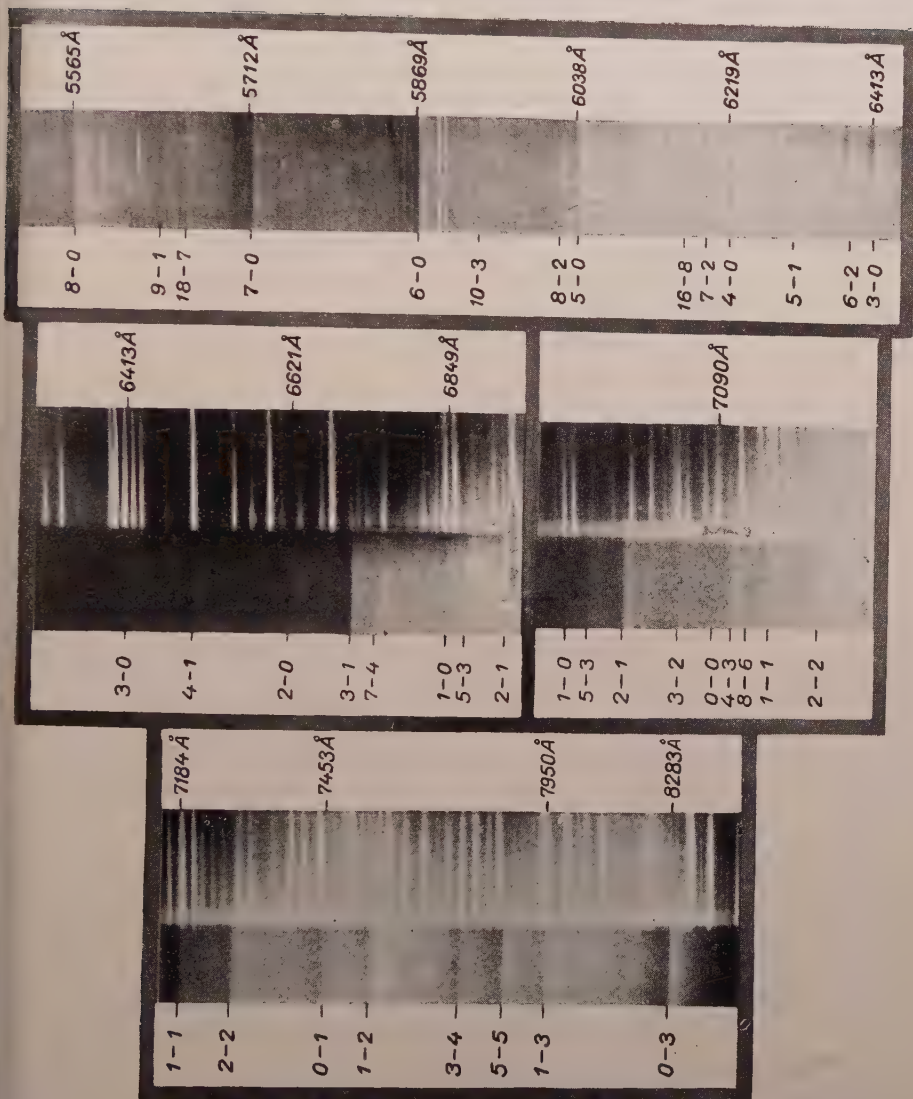


Abb. 4. Die Emissionsbanden des BiO

In Abb. 5 wird die mit Hilfe eines Registrierphotometers aufgenommene Photometerkurve der in einem Teil des sichtbaren Spektralbereiches liegenden Banden vorgeführt. Diese Kurve vermittelt ein besseres Bild über die Intensitätsverhältnisse der Banden als die Reproduktionen der Spektrogramme.

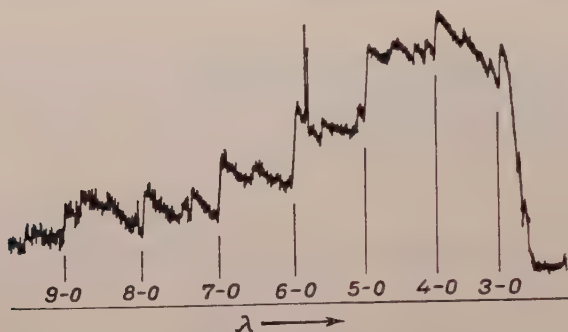


Abb. 5. Die von den Emissionsbanden des BiO angefertigte Photometerkurve. Die für die H₂O- und Bi-Atomköpfe charakteristischen Intensitätssprünge sind gut sichtbar.

Bemerkungen

Es erscheint möglich, dass das Termschema des BiO-Moleküls gemäß der Darstellung in Abb. 6 aufzubauen ist.

Die Vibrationskonstanten des unteren Zustandes der Absorptions- und der von uns gemessenen Emissionsbanden zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Obgleich die aus den Messergebnissen von SEN GUPTA berechneten Vibrationskonstanten scheinbar ebenso gut mit den Messungen von BRIDGE und HOWELL übereinstimmen, geht aus dem unmittelbaren Vergleich der Matrizendiagramme hervor, dass die von uns ermittelten Werte eine weit bessere Übereinstimmung aufweisen. In unserem Termschema werden der untere Zustand der Absorptionsbanden und der Emissionsbanden als identisch betrachtet, wobei dieser gemeinsame untere Term des Grundzustandes des BiO-Moleküls vielleicht ein $^2\Sigma$ -Term ist. Aus dem einkantigen Aussehen der Emissionsbanden folgt, dass der obere Zustand des Bandensystems gleichfalls ein $^2\Sigma$ -Term ist. Die beiden Niveaus mit der Vibrationskonstante $\omega_e = 487 \text{ cm}^{-1}$ (von BRIDGE und HOWELL als A- und B-Niveau bezeichnet) können als die zwei Komponenten eines $^2\Pi$ -Terms angesehen werden. Ähnlicherweise ist es auch möglich, dass das D- und E-Niveau mit der Vibrationskonstante $\omega_e = 770 \text{ cm}^{-1}$ den zwei Komponenten eines $^2\Pi$ -Terms gleich ist.

Ein zweifelloser Vorteil des hier vorgeführten Termschemas besteht darin, dass während sich beim Termschema nach BRIDGE und HOWELL die Frage stellt, warum die eine Komponente des Dubletts nur im Absorptionsspektrum

und die andere nur im Emissionsspektrum in Erscheinung tritt, diese Frage beim modifizierten Termschema überhaupt nicht gestellt werden kann. Auch das Bestreben von BRIDGE und HOWELL, das A - und Y -Niveau einander gleichzusetzen, kann nicht richtig sein, da nach unserer Analyse der Unterschied zwischen den Vibrationskonstanten des A - und des Y -Niveaus viel grösser ist, als dass man ihn einfach als einen Messfehler bezeichnen könnte, so dass die A - und Y -Terme nicht gleich sein können. Hieraus folgt

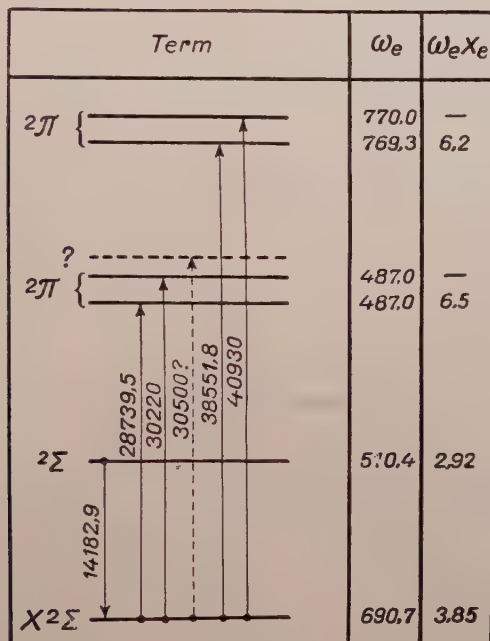


Abb. 6. Das modifizierte Termschema des BiO

ann, dass die Dublettaufspaltung des Grundzustandes von $13\,500\text{ cm}^{-1}$ von unserer Analyse nicht bestätigt wird.

Die Annahme, dass der Grundzustand des BiO-Moleküls möglicherweise vom 2Σ -Typ ist, weicht von der Konvention ab. Sämtlichen Molekülen der Stickstoffgruppe vom XO-Typ wurde nämlich bisher ein 2Π -Grundzustand zugeschrieben. Hierzu ist allerdings zu bemerken, dass diese schematische Einteilungnahme nicht zwangsläufig richtig ist. Die chemischen Eigenschaften des Bi-Atoms weichen nämlich wesentlich von denen des Phosphors, Arsens und Antimons ab, so hat z. B. das Wismut keine säurebildende, sondern eine basischenbildende Wirkung. Diese in der chemischen Bindung zum Ausdruck kommende abweichende Eigenschaft des Wismuts lässt die Annahme zu, dass

auch die Spektralstruktur seines Oxyds vom Spektrum der Oxyde des Phosphors, Arsens und Antimons abweicht. Man wird ferner darauf hinweisen können, dass der Grundzustand des O_2 -Moleküls dem ${}^3\Pi$ -Typ zugehört, während bei dem in die gleiche Kolonne gehörenden Se_2 bereits ein Grundzustand vom ${}^1\Sigma$ -Typ wahrscheinlich ist. Neuerdings haben LAGERQUIST und HULDT [1] hervorgehoben, dass von den Oxyden der Be-Gruppe der Grundzustand des CaO und SrO nicht mit voller Gewissheit als ${}^1\Sigma$ -Term angesehen werden können, wie dies als Analogie zum BeO , MgO und BaO zu erwarten wäre. Es ist also ersichtlich, dass in einer Reihe von homologen Molekülen die Grundterme nicht zwangsläufig gleich sein müssen.

Die in der vorliegenden Arbeit mitgeteilten Angaben genügen nicht, um die Frage zu entscheiden, ob das von BRIDGE und HOWELL angegebene oder das hier vorgeschlagene Termschema tatsächlich das Termschema des BiO -Moleküls ist. Diese Entscheidung wird vielleicht erst nach dem Abschluss der in Angriff genommenen Rotationsanalyse der Emissionsbanden möglich sein [8].

Molekülkonstanten

Für die Vibrationskonstanten des Grundzustandes des BiO -Moleküls ergeben sich auf Grund der Angaben von BRIDGE und HOWELL sowie auf Grund eigener Messungen folgende Durchschnittswerte:

$$\omega_e = 693,25 \text{ cm}^{-1} \quad \text{und} \quad \omega_e x_e = 4,35 \text{ cm}^{-1}.$$

Schätzt man den wahrscheinlichen Fehler von ω_e auf $\pm 10 \text{ cm}^{-1}$, den von $\omega_e x_e$ auf $\pm 1 \text{ cm}^{-1}$, so gelangt man aus dem Zusammenhang

$$D_e = \frac{1}{8063,3} \frac{\omega_e^2}{4\omega_e x_e}$$

zu

$$D_e = 3,69 \pm 0,90 \text{ eV.}$$

Es sei an dieser Stelle Prof. I. KOVÁCS für sein Interesse am Fortgang dieser Arbeit und für seine zahlreichen wertvollen Ratschläge der beste Dank des Verfassers ausgesprochen.

LITERATUR

- R. MECKE und M. GUILLERY, Phys. Z., **28**, 514, 1927.
 CH. GHOSH, Zs. f. Phys., **86**, 241, 1933.
 F. MORGAN, Phys. Rev., **49**, 41, 1936.
 S. K. RAY, Ind. J. Phys., **16**, 35, 1942.
 A. K. SEN GUPTA, Ind. J. Phys., **18**, 182, 1944.
 N. K. BRIDGE und H. G. HOWELL, Proc. Phys. Soc., **67**, 44, 1954.
 A. LAGERQUIST und L. HULDT, Arkiv f. Physik, **8**, 427, 1954.
 O. SCARI, Vorläufiger Bericht über die Untersuchung des Spektrums des BiO-Moleküls (ungar). Központi Fizikai Kutató Intézet Kiadványai (Bulletin des Zentralforschungsinstitutes für Physik), 1954.

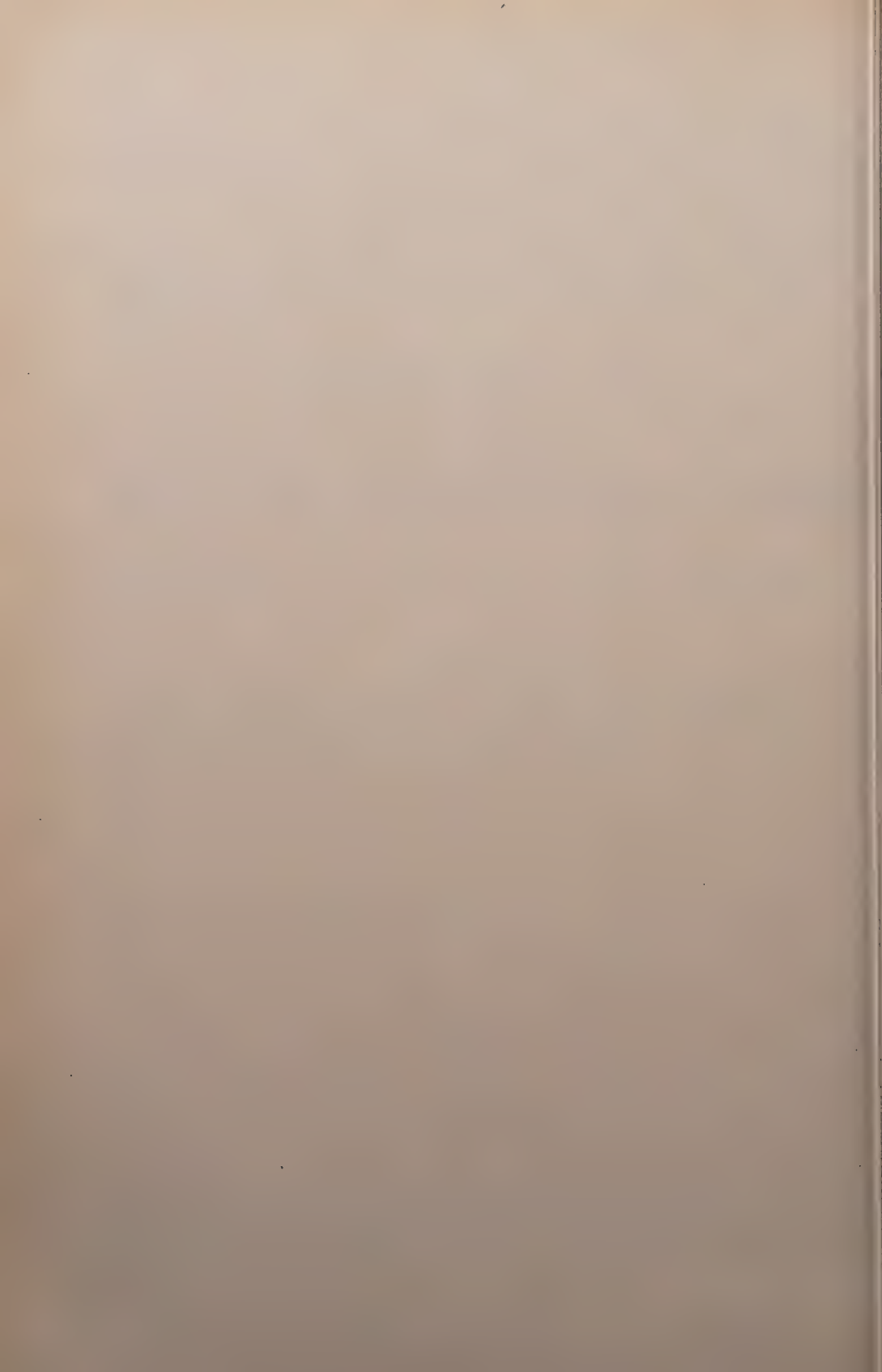
ЭМИССИОННЫЙ СПЕКТР МОЛЕКУЛЫ BiO

О. СКАРИ

Резюме

Фотографировалось несколько не обнаруженных до сих пор полос в близкой инфракрасной области эмиссионного спектра молекулы BiO. Был сделан новый вибрационный анализ, по которому длина волн главных линий полос определяется формулой:

$$\lambda = 15\,182,91 + \left\{ 510,37 \left(v' + \frac{1}{2} \right) - 2,92 \left(v' + \frac{1}{2} \right)^2 \right\} - \left\{ 690,65 \left(v'' + \frac{1}{2} \right) - 3,85 \left(v'' + \frac{1}{2} \right)^2 \right\}.$$



ON A NEW TYPE OF INTERACTION BETWEEN NUCLEONS

By

P. SZÉPFALUSY

PHYSICAL INSTITUTE OF THE UNIVERSITY FOR TECHNICAL SCIENCES, BUDAPEST

(Presented by P. Gombás. — Received 15. XI. 1955)

The purpose of the present paper is to attempt the description of the properties of a particle system consisting of protons and neutrons with the aid of a non-linear Schrödinger equation. The non-linearity of the equation is due to the fact that the interaction between the particles is allowed to depend on the wave-function of the system. Thus the interaction between more than two particles leads to many-body forces by definition. A more remote purpose of this concept is to interpret the saturation properties and shell structure of the nucleus. The present paper, however, is restricted to showing the consequences and results in the treatment of the ground state of the deuteron following from the assumption of a non-linear equation.

I. Introduction

Of the basic principles of quantum mechanics the principle of superposition of states is generally mentioned in the first place. A theory which does not maintain this principle cannot be called quantum mechanical in the generally accepted sense of the word, it may, however, be related to quantum mechanics to a certain extent. A theory abandoning the principle of superposition of states but maintaining the rest of quantum mechanical principles and methods which remain valid without the principle of superposition, could be suitably referred to as non-linear quantum mechanics. In the present paper we attempt to point out such a possibility in connection with the problem of nuclear forces within the framework of non-relativistic quantum mechanics.

For the extension of a theory in a direction leading to non-linearity examples are found in the theory of wave fields. To put it concretely: for the development of nuclear force theories by the help of non-linear equations the theory of wave fields provides three possibilities, notably the introduction of non-linearity into the meson field, into the terms representing the coupling between the meson field and the nucleon field and finally, into the nucleon field itself. The first two possibilities leave the conventional meson theory of nuclear forces unchanged, whereas non-linearity in the nucleon field leads to a meson-independent interaction between the nucleons. However, if we attempt to generalize the interaction within the framework of quantum mechanics in a way leading to non-linear quantum mechanical equations we have no other possibility than to include into the interaction the wave-function of the system.

It is, of course, doubtful how such a generalization of the interaction could be justified in quantum mechanics.

To decide this problem let us investigate how quantum mechanics describes the interaction between the individual constituents of a particle system. Quantum mechanics — in accordance with classical mechanics — finds the cause and form of the interaction in the states and physical properties of the particles. Thus, in calculating the interaction the position, velocity, possible charge, spin etc. of the particles are taken into account, i. e. the factors characteristic of the individual elements of the system and through these of the whole system. Such a description of the interaction would leave nothing to be desired in classical mechanics, in quantum mechanics however, this is not the case. In quantum mechanics a system of particles can be regarded as known if we are able to indicate, with the help of the wave-function, the micro-ensemble of micro-particles to which the system belongs. Thus we have to know the wave-function to be able to determine the physical properties of the system which may be necessary for the description of the interaction between the particles in accordance with experiment. In other words the idea is that whereas the state and interaction of the constituents of the system have so far been related to each other by separating the state of the system into the states of its constituents and introducing into the interaction the individual states and properties of the particles, it may now become necessary for the quantummechanical treatment of the forces holding together the nucleons a generalization that these forces are functions of the state, state taken in the quantummechanical sense of the word, i. e. functions of the wave-function of the system. Naturally, we have to try to relate the wave-function to the interaction in as simple a manner as possible and to derive the equation of the stationary state from the time-dependent Schrödinger equation and the equation describing the relative motion of the particles from the equation of the stationary state in the usual manner.

Such a generalization of the interaction is justified if the results obtained with it agree with experiment. Thus the interaction is expected to account for the energy and density saturation as well as for the shell structure of heavy nuclei. At the same time the solution must render properties confirmed by experiment for light nuclei as well. The present paper is devoted to the investigation of the simplest nucleus, the deuteron, consisting of one proton and one neutron. In a subsequent paper we intend to deal with the consequences of the generalization of the interaction suggested here for a two-particle system in the case of many-particle nuclei.

II. Interaction between one proton and one neutron disregarding the spin of the particles

Let us examine a closed particle system consisting of one proton and one neutron and assume that the force acting between the particles can be derived from a force function $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$, where \mathbf{r}_1 and \mathbf{r}_2 denote the coordinates of proton and neutron, respectively. Disregarding for the moment the spin of the particles the wave-function $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ of the particles satisfies the Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M_p} \Delta_1 \Phi - \frac{\hbar^2}{2M_n} \Delta_2 \Phi + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \Phi, \quad (1)$$

where \hbar denotes the Planck constant divided by 2π , t the time, M_p the mass of the proton, M_n the mass of the neutron, Δ_1 and Δ_2 the Laplace operators acting on the coordinates of the proton and the neutron, respectively. Let us assume the force function $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ of the neutron-proton interaction to be proportional to the probability of simultaneously finding the proton and the neutron in a volume element around the respective positions \mathbf{r}_1 and \mathbf{r}_2 . According to quantum mechanics this probability is proportional to $\Phi\Phi^*$. (The asterisk denotes the conjugate complex quantity.) Thus

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = C(r) \Phi\Phi^*. \quad (2)$$

In the general case $C(r)$ is a function of the distance between the two particles :

$$r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|.$$

For the stationary state the wave-function can be separated in the usual way

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}, \quad (3)$$

where E is the energy parameter.

Thus the wave-function $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ is an eigenfunction of the eigenvalue problem

$$-\frac{\hbar^2}{2M_p} \Delta_1 \varphi - \frac{\hbar^2}{2M_n} \Delta_2 \varphi + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi = E\varphi \quad (4)$$

and the potential takes the form

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C(r) \varphi\varphi^*. \quad (5)$$

By introducing the centre of mass and relative coordinates r_s and r of the particles, we get after elementary calculation that by a separation of the variables

$$\varphi(r_1, r_2) = \psi(r) e^{\frac{i}{\hbar} (p r_s)},$$

the relative motion of the particles is described by the Schrödinger equation

$$-\frac{\hbar^2}{M} \Delta \psi + V(r) \psi = E_r \psi.$$

Here

$$E_r = \frac{1}{2(M_p + M_n)} p^2 \quad (1)$$

and

$$E_r = E - E_s$$

are the energies of the motion of the centre of mass and of the relative motion of the particles, respectively, and

$$\frac{M}{2} = \frac{M_p M_n}{M_p + M_n} \quad (2)$$

is the reduced mass of the particles.

According to (5) the potential is reduced to the expression

$$V(r) = C(r) \psi \psi^*.$$

Hitherto we have disregarded the fact that some part of the interaction may be of exchange character. This defect can be compensated for by applying to the potential an operator P_{12} which may involve exchange operators. Thus e. g. the potential in (8) becomes

$$V(r) = C(r) \psi \psi^* P_{12}. \quad (3)$$

If we postulate that the square and say the z component of the angular momentum of the relative motion of the particles be integrals of motion then the allowed forms of the potential $V(r)$ and though it those of the wave-function $\psi(r)$ satisfying equation (7) will be limited.

III. Investigation of the deuteron

In this section we shall be concerned with the results obtained for the bound state of a one proton—one neutron system by the application of potential (8'). The coefficient $C(r)$ in the potential is chosen to be

$$C(r) = -|c|^2 r^2, \quad (9)$$

where $|c|^2$ is a constant. For the present this choice is only justified by the fact that it makes the solution of equation (7) analytical.

It is evident that such a solution of equation (7) for which the square and the z -component of the relative angular momentum of the particles are integrals of motion is spherically symmetrical, owing to which the operator P_{12} is the unit operator. If the wave-function $\psi(r)$ is assumed in the form

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (10)$$

the potential (8) becomes with the aid of (9)

$$V(r) = -|c|^2 uu^* \quad (11)$$

and $u(r)$ according to (7) satisfies the Schrödinger equation

$$-\frac{\hbar^2}{M} \frac{d^2 u}{dr^2} - |c|^2 uu^* u = E_r u. \quad (12)$$

A corresponding solution of this equation for the bound state is

$$u(r) = \frac{A}{ch(ar + \delta)}, \quad (13)$$

where

$$\alpha = \sqrt{-\frac{ME_r}{\hbar^2}} \quad (14)$$

and

$$E_r = -\frac{1}{2} |A|^2 |c|^2. \quad (15)$$

In the case of positive energies E_r the wave-function (13) cannot be regarded as a correct solution, because then, α being imaginary, the wave-function would involve not permissible singularities.

From the normalizing condition

$$\int \psi \psi^* dv = 4\pi \int_0^\infty uu^* dr = 1 \quad (11)$$

we obtain that

$$|A|^2 = \frac{1}{4\pi} \frac{a}{1 - th\delta} \quad (12)$$

and with this

$$E_r = -\frac{1}{64\pi^2} \frac{1}{(1 - th\delta)^2} \frac{M}{\hbar^2} |c|^4. \quad (13)$$

According to the relationship (11) the potential becomes

$$V(r) = 2E_r \frac{1}{ch^2(ar + \delta)}. \quad (14)$$

It can be seen that if $\delta > 0$, the force acting between the particles is everywhere attractive, if $\delta = 0$, this attraction reduces to zero at the point $r = 0$, and finally if $\delta < 0$, the force acting between the particles is attractive up to the point $ar = \delta$, there it becomes zero and at r values smaller than that it is repulsive. Thus, by varying the parameter δ the shape of the potential can be adjusted.

In accordance with experiment the wave-function (13) exponentially vanishes in infinity as e^{-ar} ; the potential vanishes more rapidly as e^{-2ar} :

$$u(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A e^{-\delta} e^{-ar} \quad (20)$$

and

$$V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 2E_r e^{-\delta} e^{-2ar}. \quad (21)$$

Using the measured value for the binding energy of the deuteron

$$B = -E_r = 2,226 \pm 0,003 \text{ MeV},$$

we obtain from relation (14)

$$\frac{1}{a} = 4,31 \cdot 10^{-13} \text{ cm}, \quad (22)$$

which can be regarded as the measure for the size of the deuteron; it equals the value obtained if the interaction between the neutron and the proton is described by a simple square well potential.

This simple model of the deuteron, which neglects the spin of the particles, obviously fails to account for the quadrupole and the anomalous magnetic moment of the deuteron. These effects are due to the fact that the charge distribution in the deuteron is not spherically symmetrical. The relatively small value of the quadrupole moment of the deuteron, however, suggests that the asymmetry of the charge distribution is very slight (about 4%). Thus, in treating a number of problems, the deuteron can be thought of as spherically symmetrical and the wave-function and potential obtained here can be used.

However, a difficulty of principle lies in that equation (7) has *but* spherically symmetrical solutions, which results from our assumption that the square and the z component of the angular momentum of the relative motion of the particles are integrals of motion. The problem can be solved in two ways, one of which evidently means giving up this postulate for the angular momentum. If we do so equation (7) can produce spherically non-symmetrical wave-functions as well, and by taking into account the spin of the particles and introducing into the interaction an appropriate spin dependence the possibility of finding for the ground state of the deuteron a spherically non-symmetrical solution which agrees with experiment does not seem to be precluded. This problem needs further investigations. If the spin of the particles is taken into account there is another possibility too, which we shall treat in detail below.

7. Interaction between one proton and one neutron taking into account the spin of the particles

Hitherto we have disregarded the spin of the particles. Let us now investigate how the Schrödinger equation (7) of the relative motion of the particles changes if their spin and magnetic moments are taken into account. (Our considerations refer to the equation of relative motion (7) because the preceding equations also vary with the variation of the wave-function $\psi(\mathbf{r})$ only.)

Let us now calculate the total angular momentum of the particles (the sum of their relative angular momentum due to their orbital motion and of their spin angular momenta) :

$$I = M + \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2), \quad (23)$$

where M is the relative angular momentum of the particles ; the components of the vectors σ_1 and σ_2 are the Pauli spin matrices of the proton and the neutron, respectively. The unity of angular momentum is chosen to be \hbar .

Let us postulate that the square and say the z component of the total angular momentum be integrals of motion, i. e. that they may commute with

the Hamiltonian of the relative motion of the particles. With this postulate and with the help of potential (8') we again could get but spherically symmetric wave-functions. To avoid this the above definition of the interaction potential of the particles is generalized in the following manner. Let the wave-function of relative motion take the form

$$\psi = \psi(r, \sigma_1, \sigma_2) \chi_{sm}. \quad (2)$$

The operator ψ depends on the distance between the particles and, in addition on the spin matrices σ_1 and σ_2 . χ_{sm} is a normalized spin function, which belongs to the spin state having the absolute value s and the projection m on the axis of quantization.

Using the analogue of (8') the interaction potential of the particles for symmetry reasons the following

$$V(r, \sigma_1, \sigma_2) = \frac{C(r, \sigma_1, \sigma_2)}{2} [\psi\psi^+ + \psi^+\psi] P_{12}, \quad (3)$$

where ψ^+ denotes the adjoint of ψ . Here the operator P_{12} may influence, in addition to the space coordinates of the particles, the spin variables too, and C will be no more the function of the distance r between the two particles only, but may also depend on the spin matrices σ_1 and σ_2 , as well as on the direction of the vector r between the two particles relative to the spin direction of the particles. We note that in the present paper C only appears as a function of r and we shall continue referring to it as the function $C(r)$.

The Schrödinger equation of the relative motion of the particles becomes

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta\psi + V(r, \sigma_1, \sigma_2) \psi = E_r \psi. \quad (4)$$

According to what has been said above the potential has to be of a form which to satisfy the commutation relations

$$VI^2 - I^2V = 0$$

and

$$VI_z - I_zV = 0. \quad (5)$$

V. Quadrupole and magnetic moments of the deuteron

In the present section we shall show with the help of the potential defined in (25) that among the wave-functions satisfying equation (26) we can find one which can account for the quadrupole and anomalous magnetic moment

of the deuteron. First we shall briefly describe the spherically symmetrical wave-function satisfying equation (26), which is essentially the same as the solution shown in section III.

A spherically symmetrical solution is obtained if the operator part of the wave-function is assumed in the form

$$\psi = \frac{u(r)}{r} [A + \sigma_1 \sigma_2 B]. \quad (28)$$

The operator is self-adjoint if A , B and $u(r)$ are real. For the problems of interest to us this assumption does not restrict the generality, it only makes our results more easy to survey.

With operator (28) if $C(r)$ is again assumed in accordance with (9) the potential (25) takes the form

$$V = -|c|^2 u^2(r) [A^2 + 3B^2 + 2B(A - B)\sigma_1 \sigma_2] P_{12}, \quad (29)$$

where we have used

$$(\sigma_1 \sigma_2)^2 = 3 - 2\sigma_1 \sigma_2. \quad (30)$$

This potential obviously satisfies the commutation relations (27). With the help of operator P_{12} we can choose in the potential the relation of the ordinary (Wigner) type interaction to the exchange interaction as well as the type of the exchange interaction, which can be of the Majorana, Bartlett or Heisenberg type. As our wave-function is spherically symmetrical, the exchange of the positions of the particles, i. e. an exchange of purely Majorana type does not alter the interaction and both the Bartlett and Heisenberg type exchange operators appear in the exchange of the spin directions of the two particles. Experiment shows that in the ground state of the deuteron the spins of the proton and the neutron are parallel (triplet state). It should be noted that we may speak of singlet and triplet states, because, as we shall see, the square of the total spin moment is an integral of motion for every potential occurring here. Thus here our treatment is confined to the solution for the triplet state and thus the operator P_{12} can be regarded as a unity factor. With (28) the wave-function becomes

$$\psi = \frac{u(r)}{r} [A + \sigma_1 \sigma_2 B] \chi_{1m} = (A + B) \frac{u(r)}{r} x_{1m}, \quad (31)$$

which is a solution of equation (26) if

$$u(r) = \frac{1}{ch(ar + \delta)}. \quad (32)$$

From the normalizing condition

$$\sum_{\sigma} \int \psi \psi^* dv = 1, \quad (3)$$

where the integration refers to the space coordinates and the summation the spin variables, we obtain

$$(A + B)^2 = \frac{1}{4\pi} \frac{\alpha}{1 - th\delta}. \quad (3)$$

Here the relation of α and of $|c|^2$ to the energy E_r is also given by equation (14) and (18) and thus the measure of the size of the deuteron is again given by the value in (22).

It can be seen that the spherically symmetrical solution obtained in the spin dependent case essentially agrees with the solution obtained in section III, where we neglected the spin of the particles.

Let us now examine the spherically non-symmetrical solution of equation (26). Such a solution is obtained if the operator part of the wave-function is assumed in the form

$$\psi = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}} \frac{1}{r} \left[u(r) + \sigma_1 \sigma_2 v(r) + \frac{1}{2^{3/2}} S_{12} w(r) \right], \quad (3)$$

where

$$S_{12} = \frac{3(\sigma_1 r)(\sigma_2 r)}{r^2} - \sigma_1 \sigma_2 \quad (3)$$

is known as the tensor term of nuclear forces. The operator ψ is self-adjoint if the functions $u(r)$, $v(r)$ and $w(r)$ are real, which we may postulate.

In the singlet state S_{12} is equal to zero, thus (35) would again mean a spherically symmetrical solution. In the triplet state, however, with the help of (35) the wave-function becomes

$$\psi = \psi \chi_{1m} = \frac{1}{r} \{ [u(r) + v(r)] \mathcal{I}_{101}^m + w(r) \mathcal{I}_{121}^m \}, \quad (3)$$

where

$$\mathcal{I}_{101}^m = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}} \chi_{1m} \quad (3)$$

and

$$\mathcal{I}_{121}^m = \frac{1}{2^{3/2}} \frac{1}{(4\pi)^{1/2}} S_{12} \chi_{1m} [1]. \quad (3)$$

where \mathcal{I}_{jls}^m means a wave-function dependent on spin and angle variables, belonging to a total angular momentum j which has a projection m on the axis of quantization. This total angular momentum is the combination of the orbital momentum l and the spin momentum s . Thus it can be seen that the wave-function (37) is the eigenfunction of the respective operators of the square and of the z -component of the total angular momentum and belongs to a state of a total angular momentum $j = 1$.

The parity of the wave-function (37) is even and thus our above remarks on operator P_{12} are still valid. According to the relations (25), (35) and (9) the potential is

$$V = -\frac{|c|^2}{4\pi} \left[u^2 + 3v^2 + \frac{3}{4}w^2 + \left(2uv - 2v^2 + \frac{1}{4}w^2 \right) \sigma_1 \sigma_2 + \right. \\ \left. + \left(\frac{1}{2^{1/2}}u + \frac{1}{2^{1/2}}v - \frac{1}{4}w \right) w S_{12} \right]. \quad (40)$$

where, in addition to relation (30), we have taken into account that

$$S_{12}^2 = 6 - 2S_{12} + 2\sigma_1 \sigma_2 \\ \text{and} \\ \sigma_1 \sigma_2 S_{12} = S_{12} \sigma_1 \sigma_2 = S_{12}. \quad (41)$$

This potential can commute with the respective operators of the square and the z -component of the angular momentum, which can be explained in the following way. As can be seen the operator S_{12} giving rise to a non-central interaction in the potential is identical with the one which has already appeared in the well-known forms of neutron-proton interaction. It is known that there, in the case of this tensor force, the Hamiltonian of the particles can also commute with the respective operators of the square and the z -component of their angular momenta. This also applies to the square of the total spin moment [2].

Substituting wave-function (37) and potential (40) into equation (26) we obtain after elementary calculation the equation

$$-\frac{\hbar^2}{M} \left[\frac{d^2 z}{dr^2} \mathcal{I}_{101}^m + \frac{d^2 w}{dr^2} \mathcal{I}_{121}^m - \frac{6}{r^2} w \mathcal{I}_{121}^m \right] - \frac{|c|^2}{4\pi} \left\{ \left[z^3 + 3zw^2 - \frac{1}{2^{1/2}}w^3 \right] \mathcal{I}_{101}^m + \right. \\ \left. + 3w \left[z^2 - \frac{1}{2^{1/2}}zw + \frac{1}{2}w^2 \right] \mathcal{I}_{121}^m \right\} = E_r [z \mathcal{I}_{101}^m + w \mathcal{I}_{121}^m], \quad (42)$$

where we have introduced the notation

$$u(r) + v(r) = z(r) \quad (43)$$

and have used the relations (38), (39) and (41).

Let us equate the terms belonging to the same angular momentum eigenfunction in equation (42). The following system of differential equations is then obtained for the radial wave-functions $z(r)$ and $w(r)$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{M} \frac{d^2 z}{dr^2} - \frac{|c|^2}{4\pi} z^3 - E_r z &= \frac{|c|^2}{4\pi} \left[3zw^2 - \frac{1}{2^{1/2}} w^3 \right], \\ -\frac{\hbar^2}{M} \left[\frac{d^2 w}{dr^2} - \frac{6}{r^2} w \right] - \frac{3|c|^2}{8\pi} w^3 - E_r w &= \\ &= \frac{3|c|^2}{4\pi} w \left[z^2 - \frac{1}{2^{1/2}} zw \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

Substituting wave-function (37) into the normalizing condition (33) get the relation

$$\int_0^\infty (z^2 + w^2) dr = 1. \quad (5)$$

From wave-function (37) it is evident that this state of the deuteron is a mixture of 3S_1 and 3D_1 states. Owing to the presence of 3D_1 waves the charge distribution in the deuteron deviates from spherical symmetry in such a way that the deuteron exhibits a quadrupole moment. The presence of the D -wave in this state of the deuteron is proved not only by the fact that the deuteron has a quadrupole moment but also that the magnetic moment of the deuteron is not equal to the precise sum of the magnetic moments of the neutron and the proton. Actually, the magnetic moment of the deuteron can be regarded as the sum of the magnetic moments of the neutron and the proton as well as of an additional magnetic moment related to the orbital angular momentum of the proton. It is known that the calculated magnetic moment of the deuteron corresponds to the measured values if the contribution of the 3D_1 -state in the wave-function is about 4%, i. e.

$$\int_0^\infty w^2 dr = 0,04, \quad (6)$$

which condition can give the quadrupole moment of the deuteron also in agreement with experiment [3].

Thus, a solution of the system of equations (44) that adjusts the contribution of the D -wave in wave-function (37) according to (46) describes a spherically non-symmetrical state of the deuteron which corresponds to its experimental ground state.

The solution of the system of equations (44) even in some approximation is no simple problem and has not been found so far. Thus we cannot tell for certain whether we can find a solution for the system of equations (44) with which the contribution of the D -wave could be maintained according to (46). We must keep in mind, however, that here too the function $C(r)$ in the potential has been assumed to correspond to the relation (9) although it has been pointed out that this choice of $C(r)$ is only justified by the fact that it makes our spherically symmetrical wave-functions analytical. Thus, if it seems necessary, we may proceed in such a way that the function $C(r)$ is determined from the assumption that the system of equations (44) (modified, of course, to correspond to the function $C(r)$ obtained in this way) allows for a proportioning of the functions $z(r)$ and $w(r)$ in agreement with experiment. Of course, the function $C(r)$ thus obtained must be used for examining the spherically symmetrical wave-functions of the deuteron too. This fact does not make our results obtained in section III and at the beginning of the present section illusory, because the essential part of our results can be obtained even if the function $C(r)$ varies within wide limits.

We may, however, obtain information about the behaviour of the radial wave-functions $z(r)$ and $w(r)$ for very large values of r without solving the system of equations (44). In the bound state these functions must vanish exponentially with $r \rightarrow \infty$. Thus in the case of very large r we may omit in the system of equations (44) the terms of third order in $z(r)$ and $w(r)$. The wave-functions obtained in this way are distinguished from the exact solutions by the notations $z_\infty(r)$ and $w_\infty(r)$. For these the following differential equations are obtained

$$-\frac{\hbar^2}{M} \frac{d^2 z_\infty}{dr^2} - E_r z_\infty = 0, \quad (47)$$

$$-\frac{\hbar^2}{M} \left[\frac{d^2 w_\infty}{dr^2} - \frac{6}{r^2} w_\infty \right] - E_r w_\infty = 0.$$

Suitable solutions of these equations are

$$z_\infty(r) = A e^{-\alpha r} \quad (48)$$

$$w_\infty(r) = B e^{-\alpha r} \left[\frac{1}{(\alpha r)^2} + \frac{1}{\alpha r} + \frac{1}{3} \right],$$

where A and B are constants and α is related to the energy parameter according to (14).

In the next section we shall show that the ground state of the deuteron is given by the wave-function (37). The value of α in equation (48) provides information about the size of the deuteron. Using the measured value for the binding energy of the deuteron we obtain for α the value given in (22).

VI. Ground state of the deuteron

In the preceding section we have investigated two states of the deuteron. The wave-function (31) describes a spherically symmetrical state. The wave-function (37) with the condition (46) describes an asymmetrical state, which renders a quadrupole and a magnetic moment in accordance with the experimental ground state of the deuteron. Our problem now is to decide which of the two states can be regarded as a ground state from the theoretical point of view if the interaction suggested here is taken into account. Both solutions treated above refer to the triplet state of the deuteron. First of all we shall show that the triplet state of the deuteron cannot be a spherically symmetrical state but must be an asymmetrical state described by the wave-function (37).

Let us denote the magnetic moment of the proton by μ_p and that of the neutron by μ_n in units of the nuclear magneton. If the energy due to the interaction of these two magnetic moments is taken into account the Hamiltonian of the one proton — one neutron system must be completed by the following term [4]:

$$U = \mu_p \mu_n \left[\frac{3 (\sigma_1 r) (\sigma_2 r)}{r^5} - \frac{\sigma_1 \sigma_2}{r^3} \right] = \frac{\mu_p \mu_n}{r^3} S_{12}. \quad (5)$$

In addition to this term there arises in the asymmetrical state a magnetic interaction between the orbital angular momentum of the proton and the two spins. As, according to (46) the contribution of the *D*-state is very slight, this interaction is small as compared to (50) and can be neglected.

Thus the total interaction between one proton and one neutron is

$$W = V + U, \quad (6)$$

where V is the potential defined by equation (25).

If the potential V is central the asymmetry exhibited by the wave-function owing to the interaction U is too slight to account for the measured quadrupole and magnetic moments of the deuteron. In the case of the interaction V suggested in the present paper, however, the presence of U in the interaction necessarily implies that in the triplet state V cannot be merely central but is precisely the expression (40). The reason for this is the following. The interaction U would

result in a wave-function of type (37) in the case of a central V too. This means that the operator part of the wave-function is identical with the operator in equation (35) with the aid of which we obtain for V just the form (40) if the potential is formed on the basis of equation (25). The non-central term in the potential V caused by the interaction U is much greater than U . Owing to this the latter can be neglected and for the radial functions $z(r)$ and $w(r)$ in wave-function (37) we re-obtain the system of differential equations (44). Considering the experimental fact that the ground state of the deuteron is a triplet state, the properties of the theoretical ground state agree with experiment and the ground state of the deuteron can be characterized by the following quantum numbers: $s = 1$ (total spin), $j = 1$ (angular momentum) $p = 1$ (parity).

In the singlet state $U = 0$, since $S_{12} = 0$, and the wave-function is spherically symmetrical. In the triplet state the operator P_{12} in potential V is a positive unit operator [see the discussion after equation (30)]. In the singlet state, the operator P_{12} contains exchange operators affecting the spin variables, this is not the case. Each wave-function being of even parity the operator P_{12} can be assumed in both the singlet and the triplet state in the form

$$P_{12} = W + M + (B + H) \frac{1 + \sigma_1 \sigma_2}{2}. \quad (52)$$

Here W denotes the contribution of the Wigner type interaction, i. e. the interaction without exchange. M , B and H are the contributions of the Majorana, Bartlett and Heisenberg type exchange interactions, respectively. In the triplet state

$$P_{12}^t = W + M + B + H = 1 \quad (53)$$

and in the singlet state

$$P_{12}^s = W + M - (B + H). \quad (54)$$

From these relations it can be seen that if the interaction involves Bartlett and Heisenberg type exchange operators the potential in the singlet state increases as compared to that in the triplet state (its absolute value decreases). In the triplet state, however, the kinetic energy increases as compared to that in the singlet state, owing to the azimuthal kinetic energy

$$\frac{\hbar^2}{M} \frac{l(l+1)}{r^2} = \frac{\hbar^2}{M} \frac{6}{r^2}. \quad (55)$$

arising from the presence of the D -wave. If the contributions of the Bartlett and Heisenberg type exchanges in the interaction are sufficiently great, the

potential energy increase in the singlet state may exceed the kinetic energy increase in the triplet state. In this case the triplet state must be regarded as the ground state of the deuteron, which is according to the above, an asymptotical state in agreement with experiment.

From equation (54) we may also conclude that if

$$B + H > W + M \quad (55)$$

in the singlet state the potential energy is positive, thus in this state there is no binding at all.

Naturally, the contribution of the exchange acting on the spin variable could only be determined from investigations of different character. Thus we cannot, at present, give a satisfactory answer to the question whether with the interaction suggested in this paper the ground state of the deuteron is singlet or triplet. It seems probable that in order to decide this problem relativistic effects have to be considered.

VII. Summary

We have investigated the bound state of a one proton — one neutron system. The interaction between the particles has been defined by equation (25), taking into account the condition (27) which expresses the conservation of angular momentum. This interaction, as detailed investigation in the preceding sections showed, produces results as obtained by experiment for the ground state of the deuteron. In conclusion we should like to point out that it seems to be likely that the one neutron — one neutron and the non-coulomb-like part of the one proton — one proton interaction can also be described by a potential similar to the one used for the one proton — one neutron interaction. It can be seen that the direct generalization of the potential for more than two particles leads to many-body forces by definition. The effect of these many-body forces in connection with the investigation of the characteristic properties of heavy nuclei will be the subject of a subsequent paper.

My thanks are due to Prof P. GOMBÁS for his valuable advice.

REFERENCES

1. See e. g. I. M. BLATT—F. W. WEISSKOPF: *Theoretical Nuclear Physics*, p. 101. John Wiley & Sons New York, 1952.
2. See e. g. H. A. BETHE: *Elementary Nuclear Theory*, p. 74, John Wiley & Sons, New York, 1947.
3. See e. g. reference 1, p. 109.
4. See e. g. H. BETHE: *Quantenmechanik der Ein- und Zweielekttronenprobleme* (H. Geiger, K. Scherl: *Handbuch der Physik*, Springer, Berlin, 1933) p. 377 for this interaction in the case of electrons.

НОВЫЙ ТИП МЕЖНУКЛЕОННОВОГО ОБМЕНА

П. СЕПФАЛУШИ

Резюме

Автор старается описать свойства состоящей из протонов и нейтронов системы частиц при помощи нелинейного уравнения Шредингера. Нелинейность уравнения получается тем, что допускается зависимость взаимодействия частиц от волновой функции системы. Итак, в случае больше чем двух частиц взаимодействия приводит, по смыслу деления, к силам многих тел. Дальнейшая цель заключается в том, чтобы объяснить при помощи этого свойства насыщения и оболочную структуру нуклеонов. Однако, настоящая статья ограничивается показом последствий и результатов, которые влечет за собой предположение нелинейного уравнения при рассмотрении основного состояния ядра.



DIE EIGENFUNKTIONEN UND ENERGIEEIGENWERTE DER ELEKTRONEN DES Ag-ATOMS MIT ELEKTRONENAUSTAUSCH

Von

R. GÁSPÁR und K. MOLNÁR-IVANECSKO

FORSCHUNGSGRUPPE FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER UNGARISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN,
BUDAPEST

(Vorgelegt von P. Gombás. — Eingegangen: 11. I. 1956)

In der vorliegenden Arbeit werden die Eigenfunktionen und Energieeigenwerte der Elektronen des Silberatoms mit Hilfe einer universellen Potentialfunktion berechnet. Da die als Grundlage genommene universelle Potentialfunktion auch die Austauschenergie enthält, eignen sich die Eigenfunktionen sehr gut zur Bestimmung von Atomeigenschaften. Unter Ausnutzung dieser günstigen Verhältnisse wird die diamagnetische Suszeptibilität des Ag^+ -Ions berechnet. Der so erhaltene Wert von $-30,721 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ Mol}^{-1}$ zeigt eine ziemlich gute Übereinstimmung mit dem empirischen Wert von $-24,10 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ Mol}^{-1}$.

Bei der Erforschung der Struktur einer zusammenhängenden Materie ist es von grösster Wichtigkeit, zuerst die Struktur der freien Atome zu kennen, aus denen sich die betreffende Materie zusammensetzt. Die beste Methode zur Untersuchung der Struktur von freien Atomen ist die von FOCK [1] eingeführte Erweiterung der Methode des »self-consistent field«, in der auch die Austauschenergie der Elektronen eine massgebliche Rolle spielt. Leider sind die Fockschen Gleichungen erst für verhältnismässig wenige Atome gelöst, und auch diese gehören zu den Atomen mit kleinerer Ordnungszahl. Ein auf ein Element mit grösserer Ordnungszahl bezüglicher, angenähertes »self-consistent« Feld, das auch den Austausch berücksichtigt, wird also füglich auf Interesse rechnen dürfen.

Über das Ag^+ -Ion wurden von BLACK [2] Näherungsrechnungen nach der Methode des »self-consistent field« ausgeführt. Diese geben jedoch die Eigenfunktionen und Energieeigenwerte des Ag^+ -Ions nur in der Hartreeschen Näherung. In der vorliegenden Arbeit sollen nun die Berechnungen für das Ag-Atom ausgeführt werden, weil unsere Methode speziell auf Atome gut anwendbar ist. Im Falle des Silbers kann man von den für das Atom durchgeführten Berechnungen sehr leicht auf die Berechnungen des Ions übergehen, da das Valenzelektron des Ag-Atoms ein locker gebundenes Elektron ist, dessen Anwesenheit die Elektronenverteilung des Ions nur in geringem Ausmass verändert. Infolgedessen kann die Elektronenverteilung des abgeschlossenen Atomrumpfes ohne Valenzelektron als gleich der Elektronenverteilung des Ions angenommen werden.

Tabelle I

Die radialen Eigenfunktionen f der s -Elektronen des Ag-Atoms. f in atomaren Einheit von $1/a_0^{1/2}$; x in dimensionslosen Längeneinheiten (siehe Text).

x	f				
	$1s$	$2s$	$3s$	$4s$	$5s$
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,006	0,878	0,283	0,121	0,051	0,015
0,012	1,639	0,528	0,226	0,094	0,029
0,018	2,295	0,736	0,315	0,132	0,040
0,024	2,855	0,912	0,390	0,163	0,050
0,030	3,331	1,058	0,452	0,189	0,057
0,036	3,731	1,176	0,502	0,210	0,064
0,042	4,062	1,268	0,540	0,226	0,069
0,048	4,333	1,337	0,569	0,238	0,072
0,054	4,549	1,385	0,588	0,245	0,075
0,060	4,718	1,414	0,599	0,250	0,076
0,066	4,844	1,425	0,602	0,251	0,076
0,072	4,932	1,420	0,598	0,249	0,076
0,078	4,988	1,400	0,588	0,245	0,074
0,084	5,014	1,368	0,572	0,238	0,072
0,090	5,014	1,324	0,551	0,229	0,070
0,108	4,895	1,135	0,462	0,191	0,058
0,126	4,646	0,881	0,345	0,142	0,043
0,144	4,322	0,586	0,210	0,085	0,026
0,162	3,957	0,267	0,066	0,024	0,007
0,180	3,580	-0,062	-0,081	-0,038	-0,012
0,198	3,207	-0,388	-0,225	-0,098	-0,030
0,216	2,850	-0,705	-0,362	-0,156	-0,048
0,234	2,516	-1,006	-0,490	-0,209	-0,064
0,252	2,208	-1,288	-0,606	-0,257	-0,078
0,270	1,928	-1,546	-0,709	-0,299	-0,091
0,288	1,677	-1,780	-0,798	-0,335	-0,102
0,324	1,255	-2,173	-0,931	-0,388	-0,118
0,360	0,928	-2,466	-1,006	-0,416	-0,126
0,396	0,680	-2,667	-1,027	-0,419	-0,127
0,432	0,494	-2,786	-0,999	-0,402	-0,121
0,468	0,357	-2,837	-0,930	-0,366	-0,110
0,504	0,257	-2,831	-0,827	-0,316	-0,095
0,540	0,184	-2,780	-0,696	-0,255	-0,076

Tabelle I

x	f				
	1s	2s	3s	4s	5s
0,576	0,131	-2,693	-0,545	-0,185	-0,054
0,612	0,094	-2,580	-0,380	-0,110	-0,031
0,648	0,067	-2,449	-0,205	0,032	-0,007
0,684	0,048	-2,305	-0,026	0,048	0,017
0,720	0,035	-2,155	0,154	0,125	0,041
0,756	0,026	-2,003	0,331	0,201	0,064
0,792	0,021	-1,852	0,503	0,272	0,085
0,828	0,018	-1,703	0,667	0,339	0,105
0,864	0,017	-1,560	0,822	0,400	0,124
0,900		-1,424	0,967	0,454	0,140
0,936		-1,295	1,101	0,502	0,154
1,008		-1,062	1,333	0,578	0,176
1,080		-0,862	1,518	0,625	0,189
1,152		-0,693	1,658	0,646	0,194
1,224		-0,554	1,755	0,643	0,190
1,296		-0,439	1,814	0,617	0,180
1,368		-0,346	1,840	0,573	0,165
1,440		-0,271	1,838	0,513	0,144
1,512		-0,210	1,814	0,439	0,119
1,584		-0,162	1,770	0,356	0,092
1,656		-0,123	1,713	0,266	0,062
1,728		-0,092	1,644	0,170	0,031
1,800		-0,066	1,567	0,072	-0,001
1,872		-0,045	1,485	-0,028	-0,032
1,944		-0,027	1,400	-0,127	-0,063
2,016		-0,010	1,314	-0,225	-0,093
2,088			1,228	-0,320	-0,121
2,160			1,143	-0,411	-0,148
2,304			0,982	-0,580	-0,197
2,448			0,834	-0,728	-0,237
2,592			0,701	-0,854	-0,268
2,736			0,586	-0,958	-0,290
2,880			0,486	-1,040	-0,303
3,024			0,401	-1,101	-0,308
3,168			0,329	-1,144	-0,306
3,312			0,269	-1,171	-0,297

Tabelle I

x	f				
	1s	2s	3s	4s	5s
3,456			0,219	—1,183	—0,282
3,600			0,178	—1,183	—0,262
3,744			0,144	—1,172	—0,237
3,888			0,117	—1,152	—0,209
4,032			0,094	—1,125	—0,178
4,176			0,076	—1,093	—0,145
4,320			0,061	—1,056	—0,111
4,608			0,039	—0,974	—0,038
4,896			0,026	—0,885	0,036
5,184			0,017	—0,795	0,109
5,472			0,012	—0,708	0,179
5,760			0,009	—0,626	0,245
6,048			0,007	—0,549	0,306
6,336			0,005	—0,479	0,362
6,624				—0,417	0,412
6,912				—0,361	0,456
7,200				—0,311	0,495
7,488				—0,268	0,529
7,776				—0,230	0,558
8,064				—0,197	0,582
8,640				—0,144	0,617
9,216				—0,104	0,638
9,792				—0,075	0,647
10,368				—0,054	0,646
10,944				—0,039	0,637
11,520				—0,028	0,623
12,096				—0,021	0,604
12,672				—0,015	0,582
13,248				—0,011	0,558
13,824				—0,008	0,532
14,400				—0,005	0,505
14,976				—0,003	0,478
16,128					0,424
17,280					0,373
18,432					0,326
19,584					0,283

Tabelle I

x	f				
	1s	2s	3s	4s	5s
20,736					0,244
21,888					0,210
23,040					0,180
24,192					0,154
25,344					0,131
26,496					0,111
27,648					0,094
28,800					0,080
29,952					0,068
31,104					0,057
32,256					0,048
33,408					0,040
34,560					0,034
35,712					0,028
36,864					0,024
38,016					0,020
39,168					0,016
40,320					0,014
41,472					0,011
42,624					0,009
43,776					0,007
44,928					0,006
46,080					0,004
47,232					0,003
48,384					0,002
49,536					0,001
50,688					0,000

Tabelle II

Die radialen Eigenfunktionen f der p - und d -Elektronen des Ag-Atoms und radiale Dichte D des Ag-Atoms. f in atomaren Einheiten von $1/a_0^{1/2}$; D in atomaren Einheiten von $1/a_0$; x in dimensionslosen Längeneinheiten (siehe Text).

x	f					D
	$2p$	$3p$	$4p$	$3d$	$4d$	
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,006	0,006	0,003	0,001	0,000	0,000	1,738
0,012	0,022	0,010	0,004	0,000	0,000	6,056
0,018	0,047	0,021	0,008	0,000	0,000	11,867
0,024	0,081	0,036	0,014	0,000	0,000	18,378
0,030	0,123	0,054	0,021	0,001	0,000	25,022
0,036	0,171	0,075	0,030	0,002	0,001	31,407
0,042	0,224	0,099	0,039	0,003	0,001	37,276
0,048	0,283	0,125	0,049	0,004	0,001	42,476
0,054	0,346	0,152	0,060	0,005	0,002	46,929
0,060	0,413	0,181	0,071	0,007	0,002	50,616
0,066	0,483	0,212	0,083	0,009	0,003	53,556
0,072	0,556	0,243	0,095	0,012	0,004	55,796
0,078	0,630	0,276	0,108	0,015	0,004	57,402
0,084	0,707	0,309	0,121	0,018	0,005	58,448
0,090	0,784	0,342	0,134	0,022	0,007	59,013
0,108	1,020	0,442	0,173	0,035	0,011	58,606
0,126	1,255	0,541	0,211	0,053	0,016	56,507
0,144	1,482	0,633	0,247	0,073	0,022	54,142
0,162	1,696	0,718	0,280	0,098	0,030	52,401
0,180	1,895	0,793	0,309	0,126	0,038	51,713
0,198	2,075	0,858	0,333	0,157	0,047	52,177
0,216	2,236	0,911	0,353	0,192	0,058	53,677
0,234	2,377	0,952	0,367	0,229	0,069	55,980
0,252	2,499	0,981	0,377	0,269	0,081	58,810
0,270	2,600	0,999	0,383	0,311	0,093	61,888
0,288	2,683	1,005	0,383	0,354	0,106	64,964

Tabelle II

x	f					D
	$2p$	$3p$	$4p$	$3d$	$4d$	
0,324	2,795	0,987	0,372	0,447	0,133	70,346
0,360	2,844	0,930	0,345	0,543	0,161	73,910
0,396	2,840	0,841	0,305	0,642	0,190	75,301
0,432	2,793	0,725	0,255	0,741	0,218	74,669
0,468	2,712	0,589	0,197	0,839	0,246	72,445
0,504	2,604	0,438	0,134	0,935	0,272	69,177
0,540	2,479	0,277	0,066	1,027	0,297	65,401
0,576	2,340	0,110	—0,002	1,115	0,320	61,585
0,612	2,195	—0,060	—0,071	1,197	0,341	58,085
0,648	2,046	—0,228	—0,138	1,274	0,359	55,142
0,684	1,897	—0,393	—0,203	1,345	0,375	52,891
0,720	1,751	—0,552	—0,264	1,409	0,389	51,375
0,756	1,609	—0,703	—0,321	1,467	0,400	50,571
0,792	1,474	—0,846	—0,373	1,519	0,409	50,406
0,828	1,345	—0,979	—0,420	1,564	0,415	50,774
0,864	1,223	—1,103	—0,461	1,603	0,419	51,553
0,900	1,110	—1,215	—0,497	1,636	0,420	52,618
0,936	1,005	—1,317	—0,527	1,663	0,419	53,842
1,008	0,817	—1,489	—0,570	1,701	0,411	56,380
1,080	0,660	—1,619	—0,590	1,719	0,395	58,448
1,152	0,529	—1,711	—0,591	1,720	0,371	59,617
1,224	0,422	—1,769	—0,573	1,705	0,342	59,689
1,296	0,334	—1,798	—0,539	1,678	0,307	58,652
1,368	0,264	—1,801	—0,491	1,640	0,268	56,626
1,440	0,207	—1,782	—0,433	1,594	0,226	53,797
1,512	0,161	—1,746	—0,365	1,541	0,181	50,389
1,584	0,125	—1,696	—0,290	1,483	0,134	46,625
1,656	0,096	—1,636	—0,211	1,422	0,086	42,706
1,728	0,072	—1,567	—0,128	1,358	0,036	38,803
1,800	0,053	—1,493	—0,043	1,293	—0,013	35,056

Tabelle II

x	f					D
	$2p$	$3p$	$4p$	$3d$	$4d$	
1,872	0,038	—1,416	0,042	1,227	—0,062	31,565
1,944	0,024	—1,336	0,127	1,162	—0,111	28,398
2,016	0,013	—1,257	0,211	1,097	—0,160	25,598
2,088	0,002	—1,177	0,292	1,034	—0,207	23,182
2,160		—1,100	0,370	0,973	—0,253	21,147
2,304		—0,951	0,517	0,856	—0,340	18,147
2,448		—0,815	0,648	0,748	—0,421	16,380
2,592		—0,693	0,761	0,651	—0,494	15,556
2,736		—0,585	0,857	0,564	—0,561	15,393
2,880		—0,491	0,937	0,487	—0,619	15,642
3,024		—0,411	1,000	0,419	—0,671	16,101
3,168		—0,342	1,047	0,359	—0,716	16,623
3,312		—0,283	1,082	0,307	—0,754	17,103
3,456		—0,234	1,104	0,262	—0,786	17,478
3,600		—0,193	1,115	0,223	—0,812	17,712
3,744		—0,159	1,117	0,190	—0,834	17,793
3,888		—0,130	1,111	0,161	—0,850	17,721
4,032		—0,107	1,098	0,137	—0,862	17,508
4,176		—0,087	1,079	0,116	—0,871	17,172
4,320		—0,071	1,056	0,098	—0,876	16,732
4,608		—0,047	0,998	0,070	—0,877	15,624
4,896		—0,032	0,931	0,050	—0,868	14,333
5,184		—0,021	0,859	0,035	—0,851	12,973
5,474		—0,014	0,786	0,025	—0,829	11,631
5,760		—0,010	0,714	0,018	—0,803	10,361
6,048		—0,008	0,645	0,013	—0,774	9,192
6,336		—0,007	0,580	0,009	—0,743	8,134
6,624		—0,006	0,518	0,006	—0,711	7,192
6,912			0,462	0,005	—0,679	6,360
7,200			0,411	0,004	—0,646	5,628
7,488			0,364	0,003	—0,614	4,990
7,776			0,322	0,002	—0,583	4,432

Tabelle II

x	f					D
	$2p$	$3p$	$4p$	$3d$	$4d$	
8,064			0,284		—0,552	3,946
8,640			0,220		—0,494	3,148
9,216			0,169		—0,440	2,536
9,792			0,130		—0,391	2,059
10,368			0,099		—0,347	1,684
10,944			0,075		—0,307	1,386
11,520			0,057		—0,272	1,147
12,096			0,043		—0,240	0,954
12,672			0,032		—0,212	0,796
13,248			0,024		—0,188	0,667
13,824			0,017		—0,166	0,559
14,400			0,012		—0,146	0,470
14,976			0,008		—0,129	0,395
16,128			0,002		—0,100	0,281
17,280					—0,078	0,200
18,432					—0,061	0,143
19,584					—0,047	0,102
20,736					—0,037	0,073
21,888					—0,028	0,052
23,040					—0,022	0,037
24,192					—0,017	0,027
25,344					—0,013	0,019
26,496					—0,009	0,013
27,648					—0,007	0,009
28,800					—0,004	0,007
29,952					—0,002	0,005
31,104					—0,001	0,003
32,256					0,000	0,002
33,408						0,002
34,560						0,001
35,712						0,000 ₈
36,864						0,000 ₆

In einer früheren Arbeit hatte der eine der Verfasser [3] nachgewiesen, dass das in den Atomen auf ein ausgewähltes Elektron wirkende Potentialfeld in guter Näherung für jedes Atom in der Form

$$V = \frac{Z_p e}{r} + \frac{4}{3} \frac{\kappa_a}{e} \varrho'^{1/3} = \frac{Ze}{r} \frac{e^{-\lambda_0 x}}{1 + A_0 x} + \frac{C'}{e} \frac{e^{-ax}}{1 + Ax} \quad (1)$$

geschrieben werden kann. Hier bedeutet Z die Ordnungszahl des Atoms, e die elementare Ladung, Z beim Ag-Atom 47 und Z_p die effektive Kernladung

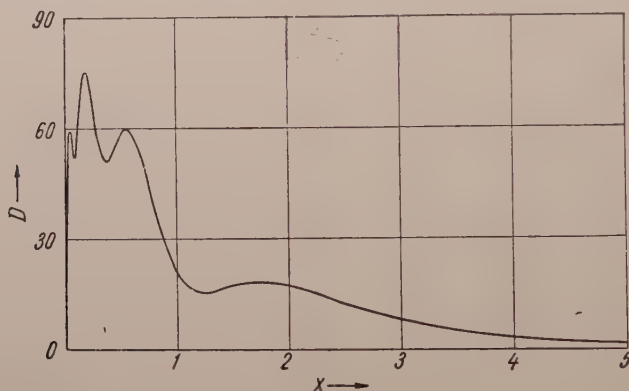


Abb. 1. Die radiale Dichte der Elektronen des Ag-Atoms, D in atomaren Einheiten; x in 2,16fachen dimensionslosen Einheiten (siehe Text).

einem Abstand r vom Atomkern; ferner ist $\kappa_a = 0,7386 e^2$ und ϱ' die Atomdichte in der Hartreeschen Näherung des »self-consistent field«. In der vorhergehenden Arbeit wurde ausführlich gezeigt, dass sich vom Gesichtspunkt der Potentials auch Z_p und ϱ' durch analytische Funktionen ersetzen lassen, die für jedes Atom sofort angeschrieben werden können. Der auf der rechten Seite stehende Ausdruck von V zeigt diese analytische Form, in der die Werte der Konstanten folgende sind:

$$\lambda_0 = 0,1837, \quad A_0 = 1,05, \quad a = 0,04, \quad A = 9.$$

Die in Gl. (1) vorkommende Länge

$$x = \frac{r}{\mu}; \quad \mu = \frac{0,8853}{Z^{1/3}} a_0$$

ist aus der statistischen Atomtheorie gut bekannt.

Da das Potential (1) kugelsymmetrisch ist, kann man die Lösung der Schrödinger-Gleichung in der Form

$$\psi = \frac{f(r)}{r} Y_{em}(\vartheta, \varphi) \quad (4)$$

annehmen, so dass man zur Bestimmung des radialen Teils die Differentialgleichung

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \left[\varepsilon + \frac{\gamma}{x} \frac{e^{-\lambda_0 x}}{1 + A_0 x} + \zeta \frac{e^{-\alpha x}}{1 + Ax} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] f = 0 \quad (5)$$

erhält. In der Gl. (5) hängt $\varepsilon = 2E\mu^2 e^{-2} a_0^{-1}$ mit dem Energieeigenwert E zusammen, ausserdem ist $\gamma = 2Z\mu a_0^{-1}$ sowie $\zeta = \frac{8}{3} \kappa_a C 0,8853^2 e^{-2} a_0$, wo $C = 3,1 a_0^{-1}$.

Die Gl. (5) wurde mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} f(0) &= f^{(l-1)} = 0, \\ f^{(l)}(0) &= \text{konst.}, \\ \lim_{x \rightarrow \infty} f(x) &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

Tabelle III

Die mit dem universellen Potential bestimmten Energietermwerte der Elektronen des Ag-Atoms und die Röntgentermwerte nach LANDOLT und BÖRNSTEIN. (Es werden die arithmetischen Mittelwerte der Röntgendubletten angegeben. Als Wert des 5s-Terms steht die erste Ionisationsenergie.) Die Energiewerte in atomaren Einheiten von e^2/a_0 .

	1s	2s	3s	4s	5s
Universelles Potential	915,95	130,82	23,26	3,22	0,214 0,244
Nach LANDOLT— BÖRNSTEIN	939,67	140,21	26,49	3,57	0,278

	2p	3p	4p	3d	4d
Universelles Potential	122,65	19,70	2,12	12,65	0,375
Nach LANDOLT— BÖRNSTEIN	126,65	21,68	2,14	13,67	0,195

gelöst. Der Gang der Lösung folgte dem in der vorhergehenden Arbeit beschriebenen. Die normierten radialen Eigenfunktionen sind tabellarisch zusammengestellt. In den Tabellen I und II wird auch die radiale Dichte des Ag-Atoms angegeben und in Abb. 1 veranschaulicht. In der Abbildung sind die den einzelnen Schalen entsprechenden Gipfel gut ersichtlich.

Das Ag ist eines der Edelmetalle. Die Elektronenkonfiguration des Ag-Atoms ist in der üblichen Bezeichnung



Die Besonderheit der Elektronenverteilung des Ag-Atoms besteht darin, dass ausserhalb der abgeschlossenen d -Schale ein Valenzelektron vorhanden ist. Die von uns berechneten Energieeigenwerte der einzelnen Elektronen sind in Tabelle III zusammengefasst, wo auch die entsprechenden Röntgentermwerte angegeben sind. Vergleicht man die Werte der Tabelle mit den Angaben anderer Berechnungen, so kann man feststellen, dass die Abweichung der Energieeigenwerte von den Röntgentermwerten nicht den bei den »self-consistent field«-Berechnungen üblichen Prozentsatz überschreitet.

Das $5s$ -Elektron sei hier noch einer gesonderten Betrachtung unterzogen. Die Eigenfunktion des $5s$ -Elektrons hängt stark vom inneren und äusseren Ablauf des Potentials ab, so dass dieser ein äusserst empfindlicher Massstab seiner Güte ist. In den inneren Feldteilen ist das Verhalten der Eigenfunktion deswegen von Bedeutung, weil dieser Feldteil die Grössenordnung des Energieeigenwertes bestimmt. Der äussere Feldteil ist dagegen deshalb von Bedeutung, weil der äussere Ablauf der Eigenfunktion viele Atomeigenschaften entscheidend beeinflusst. Von einer Erörterung des Verhaltens des Potentials im inneren Feldteil sei hier abgesehen, weil ein Blick auf die Eigenwerte genügt, um die Richtigkeit des Obengesagten zu bestätigen. In der vorhergehenden Arbeit wurde gezeigt, dass das Potential auf einem bedeutenden Gebiet des äusseren Teiles coulombartig ist, obwohl es in grösseren Entfernungen rascher verschwindet. Um den Einfluss dieses zweifellos nicht richtigen Verlaufs auf den Eigenwert und die Eigenfunktion untersuchen zu können, wurde im äusseren Feldteil das Potential modifiziert und der Energieeigenwert und die Eigenfunktion des $5s$ -Elektrons auch mit dem modifizierten Potential bestimmt. Die Modifikation erfolgte auf folgende Weise. In den äusseren Feldteilen wurde das Coulombsche Potential $\frac{e}{r}$ bis zu jenem r -Wert genommen, bei dem der Wert des universellen Potentials (1) den Wert des Coulombschen Potentials erreicht. Weiter innen wurde das Potential (1) benutzt. Da sich die Ableitungen der beiden Potentiale im erwähnten Punkt nicht allzusehr voneinander unterscheiden, konnte angenommen werden, dass sich die beiden Potentiale nicht in einem Punkt, sondern in einem kleinen Bereich aneinander anschliessen.

s. zw. so, dass auch die Ableitungen kontinuierlich ineinander übergehen. Auf diese Weise ist es nicht notwendig, mit einer Oberflächenladungsverteilung zu rechnen. In dem kleinen Bereich kann die Veränderung des Potentials vernachlässigt werden. In Tabelle III ist der erste Wert in der Kolonne des 5s-Elektrons der mit dem ursprünglichen und der zweite der mit dem modifizierten Potential berechnete. Es ist ersichtlich, dass der mit dem modifizierten Potential bestimmte Energieeigenwert nur wenig von dem ursprünglichen abweicht.

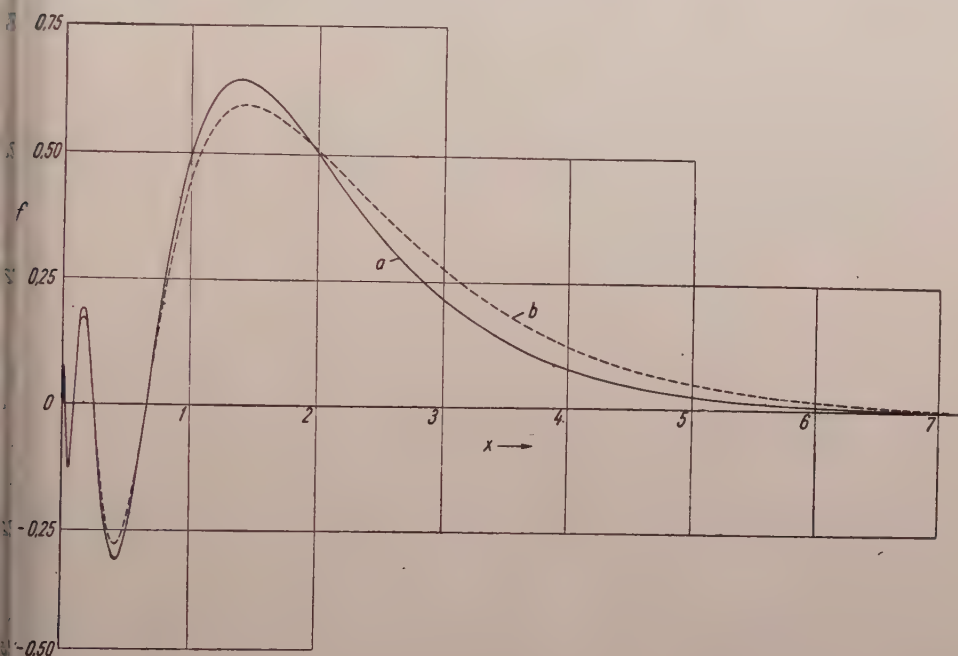


Abb. 2. Die Eigenfunktionen f der 5s-Elektronen des Ag-Atoms. a) Mit dem universellen Potential berechnet. b) Mit dem modifizierten Potential bestimmt. f in atomaren Einheiten von $1/a_0^{1/2}$, x in 7,2fachen dimensionslosen Einheiten (siehe Text).

Der in der Eigenfunktion bestehende Unterschied ist dagegen, wie dies aus der Abb. 2 hervorgeht, in den äusseren Teilen ziemlich gross und kann insbesondere bei der Berechnung von Atomeigenschaften, bei denen dieser Feldteil stärker in Betracht kommt, sogar sehr bedeutend sein.

Das Verhalten der Dichteverteilung des Atoms in den vom Atomkern entfernten Teilen kann am besten durch den Wert der diamagnetischen Suszeptibilität charakterisiert werden, weil dieser in äusserst empfindlicher Weise selbst von kleinen Veränderungen der Dichte beeinflusst wird. Die diamagnetische Suszeptibilität lässt sich durch die Formel

$$\chi = -L \frac{e^2}{6mc^2} \overline{r^2} \quad (7)$$

ausdrücken, wo L die Loschmidtsche Zahl, c die Lichtgeschwindigkeit bedeutet und

$$\overline{r^2} = \int q r^2 dv.$$

In Tabelle IV sind die Werte des Beitrages der einzelnen Elektronengruppen zur diamagnetischen Suszeptibilität des Ag^+ -Ions angegeben. Es ist höchst interessant, dass unter allen Untergruppen der Beitrag der $(4d)^{10}$ -Gruppe am beträchtlichsten ist und etwa $\frac{2}{3}$ des Gesamtwertes ausmacht. Unser

Tabelle IV

Der Beitrag der Elektronengruppen des Ag^+ -Ions zur diamagnetischen Suszeptibilität des Ag^+ -Ions. Die Werte der Teilsuszeptibilität sind in Einheiten von $10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ Mol}^{-1}$ angegeben

	χ		χ		χ
$(1s)^2$	0,002				
$(2s)^2$	0,036	$(2p)^6$	0,081		
$(3s)^2$	0,263	$(3p)^6$	0,764	$(3d)^{10}$	1,541
$(4s)^2$	1,677	$(4p)^6$	5,983	$(4d)^{10}$	20,375
s-Elektronen	1,978	p-Elektronen	6,828	d-Elektronen	21,916

Berechnungen beziehen sich auf das freie Ag^+ -Ion, wobei sich für dessen diamagnetische Suszeptibilität ein Wert von $-30,721 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ Mol}^{-1}$ ergibt. Aus Messungen an festen Körpern ist die diamagnetische Suszeptibilität des Ag^+ -Ions ebenfalls bekannt, ihr Wert beträgt $-24,10 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ Mol}^{-1}$. Vor dem Vergleich dieser beiden Werte ist indessen zu betonen, dass sich der letztere Wert auf das in einem festen Körper befindliche zusammengedrückte Ag^+ -Ion bezieht. Zieht man diesen Umstand in Betracht, so kann die Übereinstimmung des berechneten und des empirisch bestimmten Wertes der diamagnetischen Suszeptibilität als sehr gut angesprochen werden.

LITERATUR

1. V. FOCK, *ZS. f. Phys.*, **61**, 126; **62**, 795, 1930.
2. M. M. BLACK, *Mem. Proc. Manchester Lit. Phil. Soc.*, **79**, 29, 1935.
3. R. GÁSPÁR, *Acta Phys. Hung.*, **3**, 263, 1954.

СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ И ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ Ag -АТОМА С УЧЕТОМ ОБМЕНА ЭЛЕКТРОНАМИ

Р. ГАШПАР и К. МОЛЬНАР-ИВАНЕЧКО

Резюме

Определяются собственные функции и энергии электронов атома Ag при помощи универсальной, потенциальной функции. Так как универсальный потенциал, взятый за основу, содержит в себе и энергию обмена, следовательно собственные функции очень удобны для определения атомных свойств. Применением этого потенциала вычислялась диамагнитная восприимчивость иона Ag^+ ($-30,721 \cdot 10^{-6} \text{ св. см. моль}^{-1}$). Это дает довольно хорошее совпадение с эмпирическими значениями ($-24,10 \cdot 10^{-6} \text{ кв. св. моль}^{-1}$).

ÜBER DIE BINDUNG DES METALLISCHEN SILBERS

Von

R. GÁSPÁR und B. MOLNÁR

FORSCHUNGSGRUPPE FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER UNGARISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN,
BUDAPEST

(Vorgelegt von P. Gombás. — Eingegangen: 11. I. 1956)

In der vorliegenden Abhandlung werden die Gitterenergie und die Gitterkonstante des metallischen Silbers mit Hilfe des von GOMBÁS ausgearbeiteten Metallmodells berechnet, wobei auch der Einfluss der aus dem Überlappen der Ionen resultierenden Energie auf die Gitterenergie untersucht wird. Die Berechnungen bestätigen die aus den Berechnungen für das Kupfer hervorgehende Erfahrungstatsache, dass das Überlappen der Silberionen für die Bindung wesentlich ist. Die aus dem Überlappen resultierende Energie ist im Ag etwa das Doppelte wie im Cu.

Die Edelmetalle nehmen in mehrfacher Hinsicht eine besondere Stellung unter den Metallen ein. Sie besitzen ähnlich wie die Alkalimetalle ein Valenzelektron, doch befindet sich dieses Valenzelektron ausserhalb einer abgeschlossenen äusseren (nd)¹⁰-Schale, im Gegensatz zu der edelgasartigen äusseren (ns)² (np)⁶-Schale der Alkalimetalle. Die Elektronendichte der (nd)¹⁰-Schale ist selbst noch am Rande der Elementarzelle nicht vernachlässigbar klein, so dass das Überlappen der Elektronenwolken der Ionen zu berücksichtigen ist. FUCHS [1] wies als erster darauf hin, dass man beim metallischen Cu infolge des Überlappens der Elektronenwolken im Ausdruck der Gitterenergie des Metalls ein Glied einführen kann, dass die als Folge des Überlappens eintretende Energieveränderung gut beschreibt. Dieses Glied ist beim metallischen Cu bei jenem Kernabstand, wo Gleichgewicht herrscht, klein, doch nimmt es mit der Verminderung des Kernabstands so rasch zu, dass es auch eine starke Abnahme der potentiellen Energie auszugleichen vermag. Ohne dieses Glied würde das Cu-Gitter zusammenbrechen. Im Cu-Metallgitter stützen sich also, anschaulich gesprochen, die Ionenwolken aufeinander und halten so das Gitter. Aus Tabelle I geht klar hervor, dass auch bei den übrigen Edelmetallgittern eine ähnliche Lage besteht. In dieser Tabelle werden die Radien der sogenannten Elementarkugeln sowie die Radien der Edelmetallionen nach PAULING [2] angegeben. Aus der Tabelle ist ebenfalls gut ersichtlich, dass das Überlappen der Elektronenwolken der Ionen beim metallischen Cu am kleinsten ist, während es bei dem metallischen Ag und Au wesentlich grössere Werte zeigt. Eine der Folgen hiervon ist, dass die Korrektur der aus dem Überlappen herrührenden Energie, die beim metallischen Cu in der Gleichgewichtslage noch gering ist, beim metallischen Ag und Au bereits wesentlich grössere Werte annimmt. Laut unserer Berechnungen ist dieses Energiglied in der Gleichgewichtslage beim metalli-

schen Ag etwa doppelt so gross wie beim metallischen Cu, wobei es auch beim metallischen Ag — ähnlich wie beim metallischen Cu — sehr rasch mit der Verminderung des Kernabstandes zunimmt. Die theoretische Erörterung der Edelmetalle wird sehr durch den Umstand erleichtert, dass zur Berechnung ihrer Bindung von GOMBÁS [3] eine Methode ausgearbeitet wurde, die mathematisch wesentlich leichter zu handhaben ist als die von FUCHS angegebene Methode und deshalb auch leichter verallgemeinert werden kann. Die Methode von GOMBÁS weist ausserdem auch noch den Vorteil auf, dass sie keinerlei empirische oder halbempirische Konstante enthält. Für die Edelmetalle wurden neulich Berechnungen mit einem verallgemeinerten halbempirischen Hellmannschen Potential durchgeführt [6].

Tabelle I

Die einwertigen Ionenradien der Edelmetalle. Die Radien sind in Einheiten von Å angegeben

	Cu	Ag	Au
	Flächenzentriertes kubisches Gitter		
»Einwertige Ionenradien« nach PAULING	0,96	1,26	1,37
Radien der Elementarkugeln	1,41	1,59	1,59

In der vorliegenden Arbeit wurden die auf die Gitterenergie bezüglichen Berechnungen mit der von GOMBÁS [3] zur Deutung der Bindung der Edelmetalle ausgearbeiteten Methode durchgeführt. Diese Methode ist in der oben angegebenen Arbeit von GOMBÁS ausführlich geschildert; um Wiederholungen zu vermeiden, sollen deshalb hier bei jenen Formeln, die auch bei GOMBÁS zu finden sind, die dort stehenden Bezeichnungen benutzt und hier nur die abweichenden Züge eingehend diskutiert werden. Das wesentliche Merkmal der Methode von GOMBÁS besteht darin, dass sie die Bewegung der Metallelektronen in einem modifizierten Potentialfeld untersucht. Dieses modifizierte Potentialfeld ist so beschaffen, dass es die Orthogonalisierung der Eigenfunktionen der Metallelektronen auf die Eigenfunktionen des Rumpfelektrons überflüssig macht, weil sie die Zunahme an kinetischer Energie der Metallelektronen als Folge des Pauliprinzipis auftritt, in Form von potentieller Energie berücksichtigt. Gerade die um diese potentielle Energie (das dieser entsprechende Potential wird von GOMBÁS in seiner Arbeit mit F bzw. G bezeichnet) erweiterte elektrostatische potentielle Energie ist die modifizierte potentielle Energie. Von den modifizierenden Potentialen ist das mit G bezeichnete konsequent und allgemeiner anwendbar.

Der Ausdruck der Gitterenergie besteht demgemäss aus folgenden Teilen: *a)* die gegenseitige Wechselwirkungsenergie $E_C + E_A + E_W + E_K$ der als betrachteten Metallelektronen; *b)* die klassische elektrostatische Wechselwirkungsenergie $W_C + W_E$ zwischen den Metallelektronen und dem Ion

rumpf, der Durchschnittswert W_K des modifizierenden Potentials, ferner die Austauschwechselwirkungsenergie W_A und die Korrelationswechselwirkungsenergie W_W der Metallelektronen mit den Rumpfelektronen; c) schliesslich die im ersten Teil ausführlich besprochene gegenseitige Wechselwirkungsenergie H_S der Ionen. Die Summe der obigen Glieder ergibt die Gitterenergie

$$U(R) = E_C + E_A + E_W + E_K + W_C + W_E + W_A + W_W + W_K + H_S. \quad (1)$$

Hier ist $R = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/3} \delta$ der Radius der ein Atom enthaltenden Elementarkugel und δ die kleinste Entfernung von zwei Ag-Atomkernen im Gitter des metallischen Ag.

Zur Berechnung des Energiegliedes W_A benutzt GOMBÁS beim metallischen Cu die genauere Formel (3,15), bei unseren Berechnungen wurde indessen mit der weniger genauen, aber auch bei Alkalimetallen gut bewährten Formel (3,16) gearbeitet. Wie aus einigen Kontrollrechnungen hervorging, weichen die durch die beiden Formeln erhaltenen Ergebnisse bei uns nicht allzusehr voneinander ab. Der Grund hierfür liegt darin, dass die Dichte des Ag^+ -Ions innerhalb der Elementarzelle einen relativ weit grösseren Wert annimmt als beim Cu^+ -Ion. Eine andere Abweichung bei den von uns durchgeführten Berechnungen war, dass die in der Formel (3,16) vorkommende Integrationsgrenze r_g so gewählt wurde, dass r_g derjenige Radiuswert war, bei dem die Elektronendichte des Ag^+ -Ions den Wert $\varrho_0 = \left(\frac{\kappa_a}{2\kappa_k} \right)^3 = 0,003074 \frac{1}{a^3}$ annimmt. Dieser Dichtewert ist die Grenzdichte des auch um die Korrelation erweiterten Thomas—Fermi—Diracschen Atommodells [4]. Bei kleineren Werten von R kam es vor, dass $R < r_g$ war. In diesem Falle wurde natürlich als obere Grenze der Integration der Radius der Elementarkugel gewählt. Selbstverständlich wurden in diesem Falle die Dichten aufs neue normiert. Da bei den Berechnungen auch die Korrelationsenergie in Betracht gezogen wurde, darf die obige Wahl als berechtigt angesehen werden. Es sei hier bemerkt, dass es auch dann keine allzu grosse Änderung bedeuten würde, wenn bei diesem Kriterium ähnlich wie von GOMBÁS die Grenzdichte des Thomas—Fermi—Diracschen Atommodells verwendet worden wäre, weil in diesem Falle fast immer der Radius der Elementarkugel wegen $R < r_g$ die obere Grenze der Integration bestimmt und sich so die obere Grenze der Integration um die vorherige Grösse bewegt.

Bei den konkreten Berechnungen wurde so vorgegangen, dass die in der vorhergehenden Arbeit [5] bestimmte Verteilung der inneren Elektronen des Ag-Atoms als gleich der Elektronenverteilung des im metallischen Ag befindlichen Ag^+ -Ions angenommen wurde. In diesem Schritt sind zwei Näherungen enthalten. Es ist offenbar, dass die metallische Bindung die Verteilung der Elektronen des Ag^+ -Ions nur in den äusseren Feldteilen in stärkerem Ausmass ver-

ändert. Auf diese Weise vermag sie nur die äussersten Elektronen des Ag^+ -Ions stärker zu beeinflussen. Unter diesen wiederum kommen, wie dies aus den Berechnungen über die Suszeptibilität hervorging, am ehesten die äussersten ($4d$) Elektronen in Frage. So kann man denn in guter Näherung für die übrigen Elektronen des Ag^+ -Ions tatsächlich die dem Ag-Atom entsprechende Elektronenverteilung annehmen. Die Veränderung der Verteilung der ($4d$)-Elektronen ist eine äusserst schwierige Aufgabe und die statistische Theorie bietet hier eine leichtere Lösungsmöglichkeit: man berücksichtige die Deformationsenergie durch das Energieglied H_S und sehe als erste Näherung von der Veränderung der Dichte ab.

Tabelle II

Die Gitterenergie des metallischen Silbers bei verschiedenen Werten von R . Die Energiewerte der Tabelle sind in Einheiten von $\frac{e^2}{a_0}$ angegeben.

R	2,95	2,96	2,97	2,98	2,99	3	3,1
A_0	-0,0172	-0,0172	-0,0172	-0,0172	-0,0172	-0,0172	-0,0172
A_1/R	-0,4800	-0,4784	-0,4767	-0,4751	-0,4736	-0,4720	-0,4704
A_2/R^2	0,2132	0,2117	0,2103	0,2089	0,2075	0,2061	0,2047
A_3/R^3	0,1181	0,1169	0,1158	0,1146	0,1135	0,1123	0,1111
W_A	-0,2498	-0,2480	-0,2462	-0,2444	-0,2426	-0,2409	-0,2391
W_W	-0,0325	-0,0322	-0,0320	-0,0318	-0,0315	-0,0313	-0,0311
H_S	0,0356	0,0340	0,0326	0,0314	0,0303	0,0295	0,0287
U	-0,4162	-0,4132	-0,4134	-0,4136	-0,4136	-0,4135	-0,4134

Die Ergebnisse sind in Tabelle II zusammengefasst. Aus den zusammengestellten Angaben geht hervor, dass die Energie ihren Minimalwert bei der Elementarkugel vom Radius $R_0 = 2,99 a_0$ annimmt und dass sie $U_0 = 0,4136 e^2/a_0 = 11,26 \text{ eV}$ beträgt. Bei der Berechnung der Sublimationsenergie ist der Wert der ersten Ionisationsenergie des freien Atoms von der Gitterenergie zu subtrahieren. Der Wert der Ionisationsenergie ergibt sich auf Grund experimenteller Ergebnisse zu $I = 7,58 \text{ eV}$. Auf Grund von eigenen Berechnungen [5] wurde mit dem ursprünglichen universellen Potential ein Wert von $I = 5,835 \text{ eV}$ und mit dem in $1/r$ übergehenden modifizierten Potential ein solcher von $I = 6,647 \text{ eV}$ erhalten. Die entsprechenden theore-

fischen Werte der Sublimationsenergie betragen $S = 3,68$ eV bzw. $S = 5,42$ eV bzw. $S = 4,61$ eV. Unter diesen stimmt der mit der experimentell bestimmten Ionisationsenergie berechnete Wert $S = 3,68$ eV am besten mit dem empirischen Wert $S = 2,95$ eV überein. Wie bei den zwei rein theoretisch berechneten Werten ersichtlich, beeinflusst der Ablauf des Potentials den Wert der Ionisationsenergie und zugleich damit auch den durch reine Berechnung ermittelten Wert der Sublimationsenergie in hohem Grade. Es ist zu bemerken, dass in keinem der berechneten Werte der Ionisationsenergie die Korrelationswechselwirkungsenergie mit dem Atomrumpf enthalten ist. Somit ist es verständlich, dass die als Differenz zwischen der Gitterenergie und dieser Ionisationsenergie erhaltene Sublimationsenergie grösser als der gemessene Wert ist. Ferner wird auch verständlich, dass der Wert der Sublimationsenergie, wenn man mit der experimentell bestimmten Ionisationsenergie rechnet, sehr gut mit dem experimentellen Wert übereinstimmt, da ja in der experimentell ermittelten Sublimationsenergie offensichtlich auch die Korrelationsenergie enthalten ist. Diese Tatsache weist zugleich darauf hin, dass der Wert der Gitterenergie sehr gut ist, was auch noch dadurch bewiesen wird, dass der durch Berechnungen bestimmte Radius der Elementarkugel (siehe weiter oben) sehr gut mit dem experimentellen Wert $R = 3,01 a_0$ übereinstimmt.

LITERATUR

1. K. FUCHS, Proc. Roy. Soc., **151**, 585, 1935.
2. L. PAULING, J. Amer. Chem. Soc., **49**, 765, 1927.
3. P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **1**, 301, 1952.
4. P. GOMBÁS, Die statistische Theorie des Atoms (S. 99.) Springer-Verlag, Wien, 1949.
5. R. GÁSPÁR und K. MOLNÁR—IVANESKO, Acta Phys. Hung. **6**, 105, 1956.
6. K. LADÁNYI, Acta Phys. Hung., **5**, 361, 1956.

О СВЯЗИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СЕРЕБРА

Р. ГАШПАР и Б. МОЛЬНАР

Резюме

В работе определялись энергия и постоянная решетки металлического серебра при помощи металлической модели, разработанной Гомбашем. Подвергалось исследованию происходящее от перекрывания ионов действие энергии на энергию решетки. Расчеты авторов подтверждает выводимый из расчетов относительно Cu опытный факт, по которому перекрывание ионов серебра играет существенную для связи роль. Энергия, происходящая от перекрывания у ионов Ag, примерно два раза больше, чем у ионов Cu.



DIE BERECHNUNG DER ELEKTRONENVERTEILUNG DES O^{2-} -IONS MIT DER VARIATIONSMETHODE

Von

R. GÁSPÁR

und

P. CSAVINSZKY

FORSCHUNGSGRUPPE FÜR THEORETISCHE
PHYSIK, UNGARISCHE AKADEMIE DER
WISSENSCHAFTEN, BUDAPEST

PHYSIKALISCHES INSTITUT, TECHNISCHE
UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Vorgelegt von P. Gombás. — Eingegangen: 11. I. 1956)

Nach der Untersuchung einiger Fragen im Zusammenhang mit der Existenz des hypothetischen O^{2-} -Ions im gebundenen und freien Zustand wurden zur wellenmechanischen Erörterung des O^{2-} -Ions die für neutrale Atome mit kleiner Ordnungszahl gut anwendbaren Näherungsfunktionen vom Morse—Young—Haurwitz-Typ (MYH-Typ) herangezogen. Die Gesamtenergie des O^{2-} -Ions, die die Summe von Teilenergien ist, die den Charakter der kinetischen und potentiellen Energie aufweisen, wurde auf Grund des Fock'schen Energieausdruckes berechnet, wobei bewiesen werden konnte, dass der Virialsatz an der Stelle des Energieminimums fakt. gültig ist. Es wurde festgestellt, dass die durch die MYH-Methode gegebenen Näherungswerte in Übereinstimmung mit den bei den neutralen Atomen gemachten Erfahrungen auch bei negativen Ionen die Werte der Variationsparameter gut approximieren. Schliesslich wurde durch einen Vergleich zwischen der auf Grund der MYH-Methode berechneten Energie und Elektronendichte des O^{2-} -Ions und der mit der Slaterschen Methode ermittelten Werte nachgewiesen, dass die Slatersche Methode zu tieferen Energiewerten als die MYH-Methode führt, was im schnelleren Verschwinden der mit Slaterschen Funktionen bestimmten radialen Elektronendichte zum Ausdruck gelangt.

Die Verfasser der vorliegenden Abhandlung gingen in einer früheren Arbeit [1] von der Annahme aus, dass bei quantenchemischen Berechnungen solche sauerstoffhaltige anorganische Verbindungen in guter Näherung so betrachtet werden können, als ob sie aus negativen O^{2-} -Ionen und entsprechenden positiven Ionen in elektrovalenter Bindung aufgebaut wären.

Die Näherung besteht einesteiis darin, dass diese Verbindungen in der Wirklichkeit bereits in mehrfacher Hinsicht eine Abweichung vom reinen elektrovalenten Bindungstyp aufweisen; andernteils ist schon die Annahme von doppelt negativ geladenen O^{2-} -Ionen als Bestandteile des freien Moleküls oder der kristallinen Verbindung eine Hypothese, da es bisher noch nicht gelungen ist, ein solches Ion experimentell nachzuweisen.

Auf die Instabilität des freien Ions scheinen auch die auf Grund verschiedener Theorien abgeleiteten Elektronenaffinitätswerte [2] hinzuweisen, die negativ sind, wenn man die Elektronenaffinität als Energiemenge definiert, die bei der gleichzeitigen Vereinigung von zwei Elektronen und dem Sauerstoffatom frei wird. Dagegen weist die Tatsache, dass zahlreiche Metalloxyde ein kubisch flächenzentriertes Gitter kristallisieren, das ein charakteristisches Ionenengitter ist, auf das Vorhandensein des O^{2-} -Ions im Kristallverband hin.

Die Berechnung der Elektronenverteilung

Es erscheint zweckmässig, für die wellenmechanische Erörterung der O^{2-} -Ions die von MORSE, YOUNG und HAURWITZ [3] eingeführten Funktionentypen zu wählen, mit der bei der Berechnung der Elektronenverteilung von neutralen Atomen mit kleiner Ordnungszahl sehr gute Ergebnisse erzielt wurden. Von einer Begründung und eingehenden Erörterung dieser Näherungsmethode sowie von einer Besprechung der von DUNCANSON und COULSON [1] durchgeführten Untersuchung der dort begangenen Fehler sei hier, da die vorliegenden Berechnungen nicht berührt, abgesehen und nur auf die ursprüngliche Arbeit verwiesen.

Die Berechnung der Elektronenverteilung des O^{2-} -Ions, das eine Elektronenkonfiguration des Neons, d. h. $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6$ und einen $1S$ -Grundzustand besitzt, erfordert die näherungsweise Lösung eines wellenmechanischen Zehntenwertproblems. Die Näherung vom MYH-Typ ermöglicht es im Gegensatz zur Methode von SLATER [5], die im O^{2-} -Ion befindlichen $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -Elektronentypen durch verschiedene Funktionen auszudrücken, sie ist also konsequenter als die Slatersche Methode. Die Lösung der Aufgabe erfordert eine auf der Variationsmethode beruhende Rechnung mit vier Parametern.

Die Näherungseigenfunktionen vom MYH-Typ sind folgende:

$$\psi_{1s} = (\mu^3 a^3 / \pi)^{1/2} e^{-\mu ar} = \frac{P_1}{r} Y_{00},$$

$$\psi_{2s} = (\mu^5 / 3\pi N)^{1/2} [r e^{-\mu r} - (3A/\mu) e^{-\mu br}] = \frac{P_2}{r} Y_{00},$$

$$\psi_{2p_0} = (\mu^5 c^5 / \pi)^{1/2} r \cos \vartheta e^{-\mu cr} = \frac{P_3}{r} Y_{10},$$

$$\psi_{2p \pm} = (\mu^5 c^5 / 2\pi)^{1/2} r \sin \vartheta e^{-\mu cr \pm i\varphi} = \frac{P_3}{r} Y_{1 \pm 1},$$

wo a , b , c und μ Variationsparameter sind. Der Parameter μ ist ein Skalenfaktor, dessen optimaler Wert analytisch berechnet werden kann, während die Bestimmung der optimalen Werte von a , b und c nur numerisch möglich ist. Die Konstante A lässt sich aus der Orthogonalitätsbedingung ermitteln. Ihr Wert beträgt

$$A = (a+b)^3 / (1+a)^4.$$

Die in den runden Klammern stehenden Werte sind Normierungskonstanten.

Die Konstante N ist gleichfalls eine bei der Normierung auftretende Grösse, ihr Wert beträgt

$$N = 1 - \frac{48A}{(1+b)^4} + \frac{3A^2}{b^2}.$$

Der Wert der Funktionen P_i lässt sich aus den Gln. (1) bestimmen.

Ergänzt man die so umgestalteten Funktionen auch noch formal durch die Spinvariablen α und β , so kann man aus diesen vollständigen Einelektron-eigenfunktionen auf Grund der Methode von SLATER [6] die total antisymmetrische Eigenfunktion Φ des O^{2-} -Ions als eine Determinante 10. Ordnung aufbauen.

Wie bekannt, ist diese in Determinantenform angesetzte Funktion, die sich aus Einelektroneigenfunktionen aufbauen lässt, die beste, weil sie auch den sogenannten Austausch effekt zwischen den Elektronen berücksichtigt.

Die nächste Aufgabe besteht nun darin, diejenigen optimalen Werte der Parameter a , b , c und μ zu suchen, bei denen die Gesamtenergie des O^{2-} -Ions ein Minimum ist. Der Umfang der hierbei auszuführenden Rechenarbeit wird wesentlich durch den Umstand vermindert, dass MORSE, YOUNG und HAURWITZ bei der Untersuchung der von ihnen berechneten Fälle folgende Näherungsformeln zur Ermittlung der optimalen Werte der Parameter hergeleitet haben:

$$\begin{aligned} a &= 2 + \frac{1}{2} \frac{K(L+1)+L'}{[Z-(K-1)]}; & b &= \frac{(K+L)}{2} + \frac{(2+L+L')}{[Z-(K-1)]}; \\ c &= 0,80 + 0,20 L + 0,05 \frac{L(1-L-2L')}{[Z-(K-L)]}; & a\mu &= Z - 0,30 (K-1), \end{aligned}$$

wo K die Zahl der 1s-Elektronen, L die Zahl der 2s-Elektronen, L' die Zahl der p-Elektronen und Z die Ordnungszahl bedeutet.

Der Hamilton-Operator des O^{2-} -Ions (in atomaren Einheiten) lautet

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \Delta_i - Z \sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^{N_e} \frac{1}{r_{jk}}, \quad (2)$$

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \quad (i = 1, 2, \dots, N_e)$$

Der Laplace-Operator, $N_e = 10$ die Elektronenzahl des O^{2-} -Ions und $Z = 8$ die Ordnungszahl des O^{2-} -Ions ist. Das neben dem Summenzeichen im dritten Glied der Gl. (2) stehende Komma bedeutet, dass das Glied $j = k$ bei der Summation auszulassen ist.

Wird der Mittelwert des Hamilton-Operators nach Φ gebildet, so gelangt man zum Fock'schen Energieausdruck

$$E = E_K + E_C + E_W + E_A, \quad (1)$$

wo E_K die kinetische Energie der Elektronen, E_C die aus der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen den Elektronen und dem Atomkern herrührende potentielle Energie, E_W die aus der gegenseitigen elektrostatischen Wechselwirkung der Elektronen resultierende potentielle Energie und E_A die Austauschenergie der Elektronen bedeutet, die gleichfalls eine Grösse von der Natur der potentiellen Energie ist. Die zur Bestimmung der in der Gl. (3) enthaltenen einzelnen Energieglieder dienenden Ausdrücke sowie ihre explizite Form als Funktion der vier Parameter werden im Anhang angegeben.

Bestimmt man das Minimum der Energiefunktion (3) durch Variation, so ergibt sich

$$E_{MYH} = -73,61 \frac{e^2}{a_0}.$$

An der Stelle des Energieminimums beträgt der Wert der Teilenergien

$$E_K = 73,61 \frac{e^2}{a_0}, \quad E_C = -184,68 \frac{e^2}{a_0}, \quad E_W = 38,54 \frac{e^2}{a_0}, \quad E_A = -1,08 \frac{e^2}{a_0}.$$

In Kenntnis dieser Werte ist es nunmehr auch möglich, die Gültigkeit des Virialsatzes zu untersuchen, der in folgender Form geschrieben werden kann

$$2E_K = -(E_C + E_W + E_A).$$

Man kann sich durch eine einfache Substitution davon überzeugen, dass der Virialsatz an der Stelle des Energieminimums exakt gültig ist.

Diskussion

Die Gesamtenergie des O^{2-} -Ions beträgt bei Berechnung mit der Slaterschen Methode $E_{Sl} = -74,11 \frac{e^2}{a_0}$; sie ist also im Absolutwert grösser als der mit der MYH-Methode berechnete Wert, was einerseits darauf zurückzuführen ist, dass die Slatersche Methode die $2s$ - und $2p$ -Elektronen in gleicher Weise behandelt, andererseits darauf, dass es in der Slaterschen Methode nicht möglich ist, die effektiven Kernladungen zu variieren, weil die einfachen Slaterschen Funktionen nicht orthogonal zueinander sind.

Im Endergebnis ergibt sich das O^{2-} -Ion aus der Slaterschen Methode als stabiler als aus der MYH-Methode, was in Abb. 1 anschaulich dargestellt ist, wo die mit der Slaterschen Methode berechnete radiale Elektronendichte weniger rasch abfällt als die mit den MYH-Funktionen bestimmte.

Die optimalen Werte der Variationsparameter und die von der MYH-Methode gegebenen Approximationswerte sind in Tabelle I enthalten.

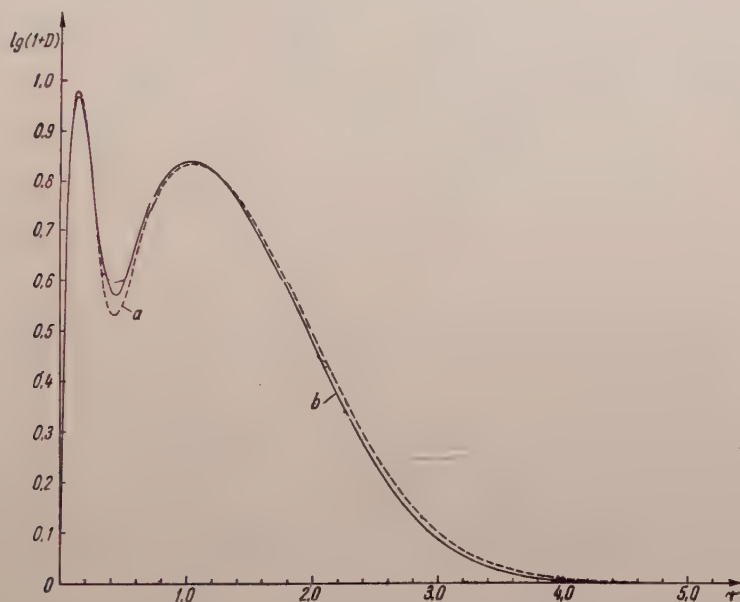


Abb. 1. Die radiale Elektronendichte des O^{2-} -Ions. a) Mit MYH-Funktionen berechnet. b) Mit Slaterschen Funktionen berechnet. (r und D in atomaren Einheiten).

Tabelle I

Die die Eigenfunktion des O^{2-} -Ions bestimmenden Variationsparameter

Parameter	Optimal	Approximativ
a	3,692	3,714
b	3,425	3,429
c	0,8789	0,8750
μ	2,0829	2,0731

Es ist ersichtlich, dass die auf zweierlei Weise berechneten Werte ziemlich gut miteinander übereinstimmen. Die approximativen Werte ermöglichen also festzustellen, in welchem Bereich die Variation der Parameter vorzunehmen ist.

An dieser Stelle sei L. PÓCS für seine Hilfe bei der Durchführung der Berechnungen gedankt.

ANHANG

Die in der Gl. (3) vorkommenden einzelnen Energieglieder können mit Hilfe der folgenden Formeln berechnet werden [7]:

$$E_K = \int_0^{\infty} \left[\left(\frac{dP_1}{dr} \right)^2 + \left(\frac{dP_2}{dr} \right)^2 + 3 \left(\frac{dP_3}{dr} \right)^2 + \frac{6}{r_2} P_3^2 \right] dr,$$

$$E_C = - \int_0^{\infty} \frac{Z}{r} (2P_1^2 + 2P_2^2 + 6P_3^2) dr,$$

$$E_W = \int_0^{\infty} \left[\frac{1}{2} (2F_0^{11} + 2F_0^{22} + 6F_0^{33}) (2P_1^2 + 2P_2^2 + 6P_3^2) - \right. \\ \left. - F_0^{11} P_1^2 - F_0^{22} P_2^2 - 3 (F_0^{33} + 2F_2^{33}) P_3^2 \right] dr,$$

$$E_A = - \int_0^{\infty} (2F_0^{21} P_1 P_2 + 6F_1^{31} P_1 P_3 + 6F_1^{32} P_2 P_3) dr.$$

Die im Ausdruck für E_W stehenden Funktionen F_l^{ik} sind auf nachstehende Weise definiert:

$$F_l^{ik}(r) = \frac{1}{2l+1} \left[\frac{1}{r^{l+1}} \int_0^r r'^l P_i(r') P_k(r') dr' + r^l \int_r^{\infty} \frac{1}{r'^{l+1}} P_i(r') P_k(r') dr' \right]$$

Wenn man nun die folgenden Bezeichnungen einführt

$$B = \frac{1}{b}, \quad F = \frac{1}{1+2a+b}, \quad K = \frac{1}{1+c}, \quad P = \frac{1}{b+c}, \\ G = \frac{1}{a+b}, \quad L = \frac{1}{a+c}, \quad Q = \frac{1}{1+3b}, \\ D = \frac{1}{a+b}, \quad H = \frac{1}{3+b}, \quad M = \frac{1}{1+b+2c}, \quad S = \frac{1}{1+a},$$

mit denen ausgedrückt

$$A = \frac{D^3}{S^4} \text{ und } N = 1 - 48AG^4 + 3A^2B^3,$$

dann lautet die explizite Form der in Gl. (3) stehenden, auf Grund der Gln. (4) berechneten Energieglieder wie folgt:

$$\begin{aligned} E_K &= \mu^2 \left\{ a^2 + 3c^2 + \frac{1}{N} [1/3 - 16AG^2(1 - G - 2bG + 3bG^2) + 3A^2B] \right\}, \\ E_C &= -Z\mu \left\{ 2a + 3c + \frac{1}{N} [1 - 2A(16G^3 - 3AB^2)] \right\}, \\ E_W &= \mu \left\{ 53/8 a + 2109/256 c - 3c^5 L^4 (2aL + 1) - 3a^3 L^2 (2c^3 L^3 + 3c^2 L^2 + 3cL + 2) \right\} + \\ &+ \frac{\mu}{N} \left\{ 4 + 2a + 3c - S^4 (2aS + 1) - a^3 S^2 (2S^3 + 3S^2 + 3S + 2) - \right. \\ &- 3c^5 K^4 (5K^3 + 5K^2 + 3K + 1) - 3K^4 (5c^3 K^3 + 5c^2 K^2 + 3cK + 1) + \\ &+ 16A [2F^3 (3aF + 1) - 2G^3 (3aG + 1) + 8a^3 G^2 F^2 (3F^2 + 4FG + 3G^2) + \\ &+ 48c^5 G^2 M^4 (10M^2 + 8GM + 3G^2) + 3M^3 (40c^3 M^3 + 24c^2 M^2 + 9cM + 2) - \\ &- 3G^3 (3cG + 2)] + 3A^2 [8B^2 - 2D^2 (aD + 1) - 2a^3 B^2 D^2 (D + B) - \\ &- 3c^5 B^2 P^4 (2P + B) + B^3 (2a + 3c) - 3P^2 (2c^3 P^3 + 3c^2 P^2 + 3cP + 2)] \left. \right\} + \\ &+ \frac{\mu^2}{N^2} \left\{ 93/256 + 8A [16G^2 H^4 (10H^2 + 8GH + 3G^2) - G^3 (3G + 2) + \right. \\ &+ H^3 (40H^3 + 24H^2 + 9H + 2)] + 3/2 A^2 [B^2 (B + 2) - B^2 G^4 (2G + B) + \\ &+ G^2 (352G^5 - 2G^3 - 6G^2 - 3G - 2)] + 48A^3 [B^2 Q^3 (3Q + B) - \\ &- B^2 G^3 (3G + B) + 4G^2 Q^2 (3Q^2 + 4GQ + 3G^2)] + 45/8 A^4 B^5 \left. \right\}, \\ E_A &= -56a^3 c^5 \mu L^7 - \frac{\mu}{N} \left\{ 88a^3 S^7 + 740/3 c^5 K^9 + 64A [a^3 D^2 F^3 (3F - 2D) - \right. \\ &- a^3 D^2 S^3 (2D + 3S) + S^2 F^2 (3F^2 + 4SF + 3S^2) + \\ &+ 4c^5 P^2 M^3 (15M^3 + 12PM^2 + 6P^2 M + 2P^3) - 4c^5 K^3 P^2 (2P^3 + 5K^3) + \\ &+ 4c^5 K^2 M^2 (15M^4 + 18KM^3 + 15K^2 M^2 + 10K^3 M + 5K^4)] + \\ &+ 24A^2 [5a^3 D^5 + 7c^5 P^7] \left. \right\}. \end{aligned}$$

Die in den Bezeichnungen der Gl. (5) vorkommenden Grössen F , H und L sind nicht mit den bereits im ersten Teil dieser Arbeit mit F , H und L bezeichneten anderen Grössen zu verwechseln.

LITERATUR

1. R. GÁSPÁR und P. CSAVINSZKY, Acta Phys. Hung., **5**, 65, 1955.
2. LANDOLT-BÖRNSTEIN, Zahlenwerte und Funktionen, S. 213, Springer, Berlin, 1950.
Bd. 1., Teil I.
3. P. M. MORSE, L. A. YOUNG und E. S. HAURWITZ, Phys. Rev., **48**, 948, 1935.
4. W. E. DUNCANSON und C. A. COULSON, Proc. Roy. Soc. (Edinb.) **62A**, 37, 1944.
5. J. C. SLATER, Phys. Rev., **36**, 57, 1930.
6. J. C. SLATER, Phys. Rev., **34**, 1293, 1929.
7. P. GOMBÁS, Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, Birkhäuser, Basel 1950. § 36.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ O^{2-} -ИОНА ВАРИАЦИОННЫМ МЕТОДОМ

Р. ГАШПАР и П. ЧАВИНСКИ

Резюме

После рассмотрения некоторых вопросов, касающихся существования гипотетического O^{2-} -ионов в свободном и связанном состоянии, приближенные собственные функции типа Морзе, Юнга, Горвитца, уже примененные с хорошими результатами для нейтральных атомов малых порядковых номеров, применялись к рассмотрению O^{2-} -иона. Суммарная энергия O^{2-} -иона, являющаяся суммой частных энергий кинетического и потенциального характера, вычисляется на основе формулы Фока для энергии, и подтверждается, что теорема вириала точно выполняется в минимуме энергии. Было установлено, что в соответствии с результатами, полученными в случае нейтральных атомов, приближенные формулы, полученные методом МЮГ, дают хорошее приближение для значений вариационных параметров и в случае отрицательного иона. Наконец, сравнивая энергия и радиальную плотность электронов O^{2-} -иона, исчисленную методом МЮГ, с полученными при помощи метода Слэтера результатами, авторы доказали, что метод Слэтера дает энергию более низкую, чем метод МЮГ, что выражается в более быстром исчезновении радиальной плотности электронов, исчисленной с помощью функции Слэтера.

DIE WEIZSÄCKERSCHE INHOMOGENITÄTSKORREKTION IN DEM STATISTISCHEN MOLEKÜLMODELL

Von

W. KOŁOS

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER POLNISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN,
WARSAU, POLEN

(Vorgelegt von P. Gombás. — Eingegangen 20. I. 1956)

Die Wichtigkeit der Weizsäckerschen Inhomogenitätskorrektur der kinetischen Energie in der statistischen Berechnung der Energie der Moleküle ist am Beispiel des N_2 -Moleküls gezeigt. Das Ritzsche Verfahren, mit zwei Variationsparametern in der Elektronendichtefunktion, wurde angewendet zur Berechnung der Energie des N_2 -Moleküls und N-Atoms, mit und ohne der Weizsäckerschen Korrektur. Obwohl man in beiden Fällen keine Bindung bekommt, ist die mit der Berücksichtigung der Weizsäckerschen Korrektur berechnete Abstossungsenergie viel kleiner als die, die ohne dieser Korrektur erhalten wurde, was in Verbindung mit den Resultaten von Sheldon erwarten lässt, dass die Berücksichtigung der Weizsäckerschen Korrektur zu einem stabilen Molekül führen kann.

I

Das statistische Atommodell wurde in letzter Zeit wesentlich erweitert. Die Thomas-Fermische Theorie, ergänzt mit der WEIZSÄCKERSchen [1] Inhomogenitätskorrektur der kinetischen Energie des statistischen Atoms und mit der von GOMBÁS [2] gegebenen Weiterentwicklung dieser Korrektur führt zu den Resultaten, hinsichtlich der Energie des statistischen Atoms, die in sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten sind. Die statistische Theorie der Moleküle ist aber bei weitem nicht in dem Masse entwickelt wie die der Atome und die Resultate der Theorie sind bis jetzt auch nicht befriedigend. Die Lösung der Thomas-Fermischen Gleichung in den Fällen, in denen keine Kugelsymmetrie des Potentials vorhanden ist, führt zu sehr grossen mathematischen Schwierigkeiten und demzufolge fast alle bisherige Arbeiten nur die zweiatomigen aus gleichen Kernen aufgebauten Moleküle behandeln, für welche man noch die Berechnungen verhältnismässig einfach durchführen kann.

Eine Näherungslösung der Thomas-Fermischen Gleichung für zweiatomige Moleküle hat zuerst HUND [3] gegeben, jedoch wird die von ihm gefundene Dichteverteilung der Elektronen am Ort der Kerne unendlich und verschwindet in den äusseren Gebieten des Moleküle zu langsam.

Einen wesentlichen Fortschritt in der statistischen Theorie der Moleküle hat SHELDON [4] erreicht, der die Thomas-Fermische Gleichung für das Stickstoffmolekül, mit Austausch ergänzt, für verschiedene Kernabstände nume-

risch gelöst hat. Sheldon hat aber keine Bindung bekommen. Die Ursache dessen liegt, der Meinung des Verfassers nach, darin, dass Sheldon die oben erwähnte Korrekturen der kinetischen Energie der Elektronen vernachlässigt hat, die, wie man aus der Theorie des statistischen Atoms weiss, sehr wesentlich sind. Die Vernachlässigung dieser Korrekturen führt zu einem Energiewert, der bedeutend tiefer als der experimentelle liegt. Das ist auch aus Sheldons Resultaten zu sehen, der für das N Atom eine Energie von $-77,95$ a. E. bekommen hat, gegenüber dem experimentellem Wert von $-54,58$ a. E. [5]

Leider ist die Berücksichtigung der Korrektur von Gombás bis jetzt nur in solchen Fällen möglich, in denen eine Kugelsymmetrie des Potentials vorhanden ist. Die Berücksichtigung der Weizsäckerschen Korrektur, ist zwar möglich, führt jedoch in einem Mehrzenterproblem zu sehr grossen mathematischen Schwierigkeiten und wurde in der vorliegenden Arbeit nur in einer groben Näherung in Betracht gezogen. Das Ziel dieser Arbeit war zu zeigen, dass die Weizsäckersche Korrektur für die Berechnung der Bindungsenergie der Moleküle, sowie für die Dichteverteilung der Elektronen sehr wesentlich ist.

Zu diesem Zwecke haben wir als Beispiel das Stickstoffmolekül gewählt, um unsere Resultate mit den Sheldonschen vergleichen zu können und die Energie des Moleküls sowie die des Stickstoffatoms mit Hilfe des Ritzschen Verfahrens berechnet und zwar mit einem Ansatz, der zwei Variationsparameter enthält. Die Rechnungen haben wir für zwei Fälle durchgeführt. Im ersten Falle haben wir die Weizsäckersche Korrektur berücksichtigt und im zweiten haben wir das Energieminimum ohne dieser Korrektur berechnet. In beiden Fällen haben wir bei dem experimentellen Kernabstand ($R = 1,096$ Å) keine Bindung bekommen, was jedoch nicht überraschend ist, da man aus den Resultaten für das Stickstoffatom sehen kann, dass diese Näherung noch zu grob ist und man noch weitere Variationsparameter einbauen müsste um befriedigende Resultate zu bekommen. Man kann aber von unseren Resultaten sehen, dass die Berücksichtigung der Weizsäckerschen Korrektur die Abstossung der Atome verkleinert, man kann also hoffen, dass, wenn die Berechnungen so genau wie die von Sheldon durchgeführt wären, man eine Bindung bekommen könnte.

II

Bekanntlich ist die Energie des statistischen Atommodells, wenn man die Korrektur von Gombás vernachlässigt, durch den Ausdruck

$$E = E_f + E_w + E_p^k + E_p^e + E_a \quad (1)$$

gegeben, wo E_f den Fermischen kinetischen Energieanteil, E_w den Weizsäckerschen kinetischen Energieanteil, E_p^k die aus der Wechselwirkung des Kerns

mit der Elektronenwolke resultierende elektrostatische potentielle Energie, E_p^e die aus der gegenseitigen Wechselwirkung der Elektronen des Elektronengases resultierende elektrostatische potentielle Energie und E_a die Austauschenergie bezeichnen.

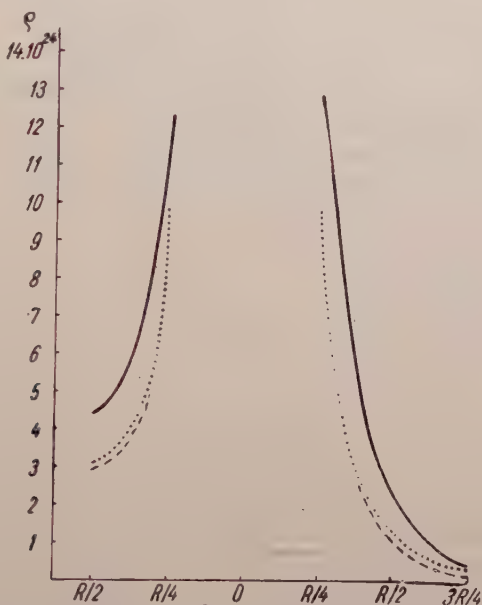


Fig. 1. Elektronendichte auf der Kernverbindungsline im N_2 -Molekül. a) Ausgezogene Kurve — aus Formel (7) mit $\lambda R = 3,35$ und $cR^2 = 1,5$ berechnet; b) gestrichelte Kurve — nach Hund; c) punktierte Kurve — nach Sheldon.

Für diese Energieanteile haben wir folgende Ausdrücke

$$E_f = 2\kappa_0 \int \rho^{5/3} dv, \quad (2)$$

$$E_w = \kappa_w \int \frac{(\text{grad } \rho)^2}{\rho} dv, \quad (3)$$

$$E_p^k = - \int \frac{Ze^2}{r} \rho dv, \quad (4)$$

$$E_p^e = \frac{1}{2} e^2 \iint \frac{\rho(r) \rho(r')}{|r - r'|} dv dv', \quad (5)$$

$$E_a = - \kappa_a \int \rho^{4/3} dv. \quad (6)$$

Die Energie des statistischen Molekülmodells kann man ganz analog zur Formel (1) berechnen, man muss sie nur mit der aus der Wechselwirkung der Kerne resultierenden potentiellen Energie ergänzen und in E_p^k die Wechselwirkung der Elektronen des Elektronengases mit allen Kernen berücksichtigen.

Um die Energie des Moleküls zu berechnen haben wir für die Dichteverteilung der Elektronen folgenden Ansatz gemacht

$$\varrho = \frac{N_M}{A} e^{-\lambda(r_a+r_b)} [1 + c(r_a - r_b)^2]^3,$$

wo λ und c zwei Variationsparameter sind, die aus der Minimumsforderung der Energie bestimmt werden.

Die Elektronendichte hat der Bedingung

$$\int \varrho edv = N_M \quad (8)$$

zu genügen, wo N_M die Anzahl der Elektronen des Moleküls ist.

Im Falle des statistischen Atommodells machen wir einen Ansatz, der aus (7) folgt, wenn wir r_a bzw. r_b gleich Null setzen

$$\varrho = \frac{N_A}{A} e^{-\lambda r} (1 + cr^2)^3$$

und in der Bedingung (8) anstatt N_M die Anzahl der Elektronen des Atoms (N_A) setzen.

Die analytischen Ausdrücke für die Energieanteile (2) bis (6) mit den Dichteverteilungen (7) bzw. (9) sind im Anhang angegeben.

Das Energieminimum wurde auf numerischem Wege berechnet und die Resultate (in atomaren Einheiten), sowie die dem Minimum entsprechenden Werte der Variationsparameter sind in der Tabelle 1 zusammengestellt. R ist der empirische Wert des Kernabstandes $R = 1,096 \text{ \AA}$.

Tabelle I

	N_2 Molekül			N Atom		
	λR	cR^2	$-E$	λ	c	$-2E$
Mit der Weizsäckerschen Korrektur.....	3,35	1,5	60,6	5,5	0,66	65,0
Ohne der Weizsäckerschen Korrektur	4,70	5,1	86,4	8,5	1,80	98,4
Resultate von Sheldon	—	—	154,80	—	—	155,8

Wir sehen, wie dies schon in der Einleitung erwähnt wurde, dass bei Berücksichtigung der Weizsäckerschen Korrektur eine Verkleinerung der Abstossung der Atome entsteht. Für diese Abstossungsenergie hat Sheldon einen noch viel kleineren Wert bekommen, also kann man erwarten, dass wenn

die Berechnungen von Sheldon mit der Weizsäckerschen Korrektur ergänzt würden, das Molekül stabil wäre.

Die Dichteverteilung der Elektronen, die wir mit (7) berechnet haben, wobei für die Variationsparameter λ und c die aus der Minimumsforderung der Energie bestimmten Werte eingesetzt wurden, sind graphisch in Fig. 1 dargestellt und mit den Resultaten von Hund und Sheldon verglichen. Im Gegensatz zu den Hundschen Resultaten haben wir eine endliche Elektronendichte am Ort der Kerne und ein schnelleres Abfallen in den von den Kernen weit entfernten Gebieten bekommen, die Elektronendichte ist jedoch in den äusseren Gebieten des Moleküls noch immer zu gross. In dem Falle, in welchem wir die Weizsäckersche Korrektur vernachlässigten, haben wir am Ort der Kerne eine grosse Elektronendichte bekommen (und zwar beträgt diese in 10^{-24} cm³ Einheiten 223,2 im Gegensatz zu dem Dichtewert von 69,24, den wir mit Berücksichtigung der Weizsäckerschen Korrektur erhielten), und zwischen den Kernen eine kleinere Elektronendichte als in der selben Entfernung in den äusseren Gebieten des Moleküls. Das entspricht der grossen Abstossung, die in der Berechnung der Energie erhalten wurde.

Herrn Professor P. GOMBÁS bin ich für zahlreiche Diskussionen und wertvolle Ratschläge zum besten Dank verpflichtet. Der Ungarischen Akademie der Wissenschaften sei auch hier mein Dank ausgesprochen für die Ermöglichung dieser Arbeit teilweise in dem Physikalischen Institut der Technischen Universität in Budapest durchzuführen.

ANHANG

Die Integrale, die man aus (2) bis (6) mit dem Ansatz (7) bekommt, können leicht ausgewertet werden, wenn man die elliptische Koordinaten

$$\mu = \frac{1}{R}(r_a + r_b), \quad \nu = \frac{1}{R}(r_a - r_b)$$

eingeführt. Sie lassen sich dann auf die bekannten Integrale

$$A_m(a) = \int_1^\infty e^{-a\mu} \mu^m d\mu$$

und

$$W_\tau(m, n; a) = \int_1^\infty \int_1^\infty Q_\tau(\mu_+) P_\tau(\mu_-) e^{-a(\mu_1 + \mu_2)} \mu_1^m \mu_2^n d\mu_1 d\mu_2$$

reduziert sein.

Die Methode der Berechnung der Integralen $W_\tau(m, n; \alpha)$ wurde durch KOTANI [7] und Mitarbeiter angegeben; sie haben für verschiedene Werte von m, n, α diese Integrale und ebenso auch die Integrale $A_m(\alpha)$ numerisch berechnet und tabellarisiert.

A in (7) kann man aus (8) berechnen, wenn man $e = a_0 = 1$ setzt, bekommt man

$$A = \frac{\pi R^3}{1} \{J_0(\alpha) + 3dJ_2(\alpha) + 3d^2J_4(\alpha) + d^3J_6(\alpha)\},$$

wo

$$\alpha = \lambda R,$$

$$d = cR^2,$$

$$J_n(\alpha) = \frac{A_2(\alpha)}{n+1} - \frac{A_0(\alpha)}{n+3}$$

ist.

Wenn wir folgende Abkürzungen einführen

$$\beta = 5a/3,$$

$$\gamma = 4a/3,$$

bekommen wir für die verschiedenen Energieanteile

$$E_f = \kappa_0 \pi R^3 \left(\frac{N_M}{A} \right)^{5/3} \{J_0(\beta) + 5dJ_2(\beta) + 10d^2J_4(\beta) + 10d^3J_6(\beta) + \\ + 5d^4J_8(\beta) + d^5J_{10}(\beta)\},$$

$$E_a = - \frac{\kappa_a \pi R^3}{2} \left(\frac{N_M}{A} \right)^{4/3} \{J_0(\gamma) + 4dJ_2(\gamma) + 6d^2J_4(\gamma) + 4d^3J_6(\gamma) + \\ + d^4J_8(\gamma)\},$$

$$E_p^k = - 2Z\pi R^2 A_1(\alpha) \frac{N_M}{A} \left\{ 1 + d + \frac{3d^2}{5} + \frac{d^3}{7} \right\},$$

$$E_w = 2\pi R \kappa_w \frac{N_M}{A} \left\{ \alpha^2 [A_2(\alpha) - A_0(\alpha)] (1 + d) + \frac{3d^2}{5} \left[\alpha^2 [A_2(\alpha) - A_0(\alpha)] + \right. \right. \\ \left. \left. + 8A_0(\alpha) \right] + \frac{d^3}{7} \left[\alpha^2 [A_2(\alpha) - A_0(\alpha)] + \frac{72}{5} A_0(\alpha) \right] \right\},$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_p^e = & \frac{\pi^2 R^5}{16} \left(\frac{N_M}{A} \right)^2 \left\{ K_{00}(a) + 6dK_{02}(a) + 3d^2[3K_{22}(a) + 2K_{04}(a)] + \right. \\ & + 2d^3[K_{06}(a) + 9K_{24}(a)] + 3d^4[3K_{44}(a) + 2K_{26}(a)] + \\ & \left. + 6d^5 K_{46}(a) + d^6 K_{66}(a) \right\}, \end{aligned}$$

70

$$K_{mn}(a) = \iint \frac{e^{-a(\mu_1 + \mu_2)} \nu_1^m \nu_2^n}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dv_1 dv_2.$$

Die Integrale $K_{mn}(a)$ kann man auf die Integrale $W_\tau(m, n; a)$ reduzieren

$$K_{00} = 4W_0(2,2) - \frac{8}{3}W_0(0,2) + \frac{4}{9}W_0(0,0) + \frac{16}{45}W_2(0,0),$$

$$K_{20} = \frac{4}{3}W_0(2,2) - \frac{56}{45}W_0(0,2) - \frac{16}{45}W_2(0,2) + \frac{4}{15}W_0(0,0) + \frac{32}{105}W_2(0,0),$$

$$K_{40} = \frac{4}{5}W_0(2,2) - \frac{88}{105}W_0(0,2) - \frac{32}{105}W_2(0,2) + \frac{4}{21}W_0(0,0) + \frac{16}{63}W_2(0,0),$$

$$K_{60} = \frac{4}{7}W_0(2,2) - \frac{120}{189}W_0(0,2) - \frac{16}{63}W_2(0,2) + \frac{4}{27}W_0(0,0) + \frac{64}{297}W_2(0,0),$$

$$\begin{aligned} K_{22} = & \frac{4}{9}W_0(2,2) + \frac{16}{45}W_2(2,2) - \frac{8}{15}W_0(0,2) - \frac{64}{105}W_2(0,2) + \frac{4}{25}W_0(0,0) + \\ & + \frac{64}{245}W_2(0,0) + \frac{246}{11025}W_4(0,0), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_{44} = & \frac{4}{25}W_0(2,2) + \frac{64}{245}W_2(2,2) + \frac{256}{11025}W_4(2,2) - \frac{8}{35}W_0(0,2) - \\ & - \frac{64}{147}W_2(0,2) - \frac{512}{8085}W_4(0,2) + \frac{4}{49}W_0(0,0) + \frac{80}{441}W_2(0,0) + \\ & + \frac{256}{5929}W_4(0,0) + \frac{13312}{9018009}W_6(0,0), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_{66} = & \frac{4}{49}W_0(2,2) + \frac{89}{441}W_2(2,2) + \frac{256}{5929}W_4(2,2) + \frac{1024}{693693}W_6(2,2) - \\ & - \frac{8}{63}W_0(0,2) - \frac{640}{2079}W_2(0,2) - \frac{1024}{11011}W_4(0,2) - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{8192}{1486485} W_6(0,2) + \frac{4}{81} W_0(0,0) + \frac{1280}{9801} W_2(0,0) + \left(\frac{32}{143}\right)^2 W_4(0,0) + \\
& + 13 \left(\frac{128}{6435}\right)^2 W_6(0,0) + 17 \left(\frac{256}{109395}\right)^2 W_8(0,0), \\
K_{24} = & \frac{4}{15} W_0(2,2) + \frac{32}{105} W_2(2,2) - \frac{184}{525} W_0(0,2) - \frac{856}{2205} W_2(0,2) - \\
& - \frac{256}{11025} W_4(0,2) + \frac{4}{35} W_0(0,0) + \frac{32}{147} W_2(0,0) + \frac{256}{8085} W_4(0,0), \\
K_{26} = & \frac{4}{21} W_0(2,2) + \frac{16}{63} W_2(2,2) - \frac{248}{945} W_0(0,2) - \frac{6304}{14553} W_2(0,2) - \\
& - \frac{256}{8085} W_4(0,2) + \frac{4}{45} W_0(0,0) + \frac{128}{693} W_2(0,0) + \frac{512}{15015} W_4(0,0), \\
K_{46} = & \frac{4}{35} W_0(2,2) + \frac{32}{147} W_2(2,2) + \frac{256}{8085} W_4(2,2) - \frac{376}{2205} W_0(0,2) - \\
& - \frac{1776}{4851} W_2(0,2) - \frac{89344}{1156155} W_4(0,2) - \frac{1024}{693693} W_6(0,2) + \\
& + \frac{4}{63} W_0(0,0) + \frac{320}{2079} W_2(0,0) + \frac{512}{11011} W_4(0,0) + \frac{4096}{1486485} W_6(0,0),
\end{aligned}$$

wo wir wie gewöhnlich, Einfachkeitshalber statt $W_\tau(m, n; \alpha)$ $W_\tau(m, n)$ geschrieben haben.

Für das Atom bekommt man mit dem Ansatz (9)

$$\begin{aligned}
A &= \frac{8\pi}{\lambda^9} (\lambda^6 + 36c\lambda^4 + 1080c^2\lambda^2 + 20160c^3), \\
E_f &= \frac{8\pi\kappa_0}{a^{13}} \left(\frac{N_A}{A}\right)^{5/3} (2a^{10} + 5 \cdot 4! c a^8 + 10 \cdot 6! c^2 a^6 + 10 \cdot 8! c^3 a^4 + \\
& + 5 \cdot 10! c^4 a^2 + 12! c^5), \\
E_a &= -\frac{4\pi\kappa_a}{b^{11}} \left(\frac{N_A}{A}\right)^{4/3} (2b^8 + 4 \cdot 4! c b^6 + 6 \cdot 6! c^2 b^4 + 4 \cdot 8! c^3 b^2 + 10! c^4), \\
E_w &= \frac{\pi N_A}{\lambda^7 A} (\lambda^6 + 72c^2\lambda^2 + 2880c^3), \\
E_p^k &= -\frac{4\pi Z N_A}{\lambda^8 A} (\lambda^6 + 3 \cdot 3! c \lambda^4 + 3 \cdot 5! c^2 \lambda^2 + 7! c^3),
\end{aligned}$$

$$E_p^e = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{N_A}{A} \right)^2 \{ M_{00}(\lambda) + 6cM_{02}(\lambda) + 3c^2 [2M_{40}(\lambda) + 3M_{22}(\lambda)] + \\ + 2c^3 [M_{60}(\lambda) + 9M_{24}(\lambda)] + 3c^4 [3M_{44}(\lambda) + 2M_{26}(\lambda)] + \\ + 6c^5 M_{46}(\lambda) + c^6 M_{66}(\lambda) \},$$

$$a = 5\lambda/3, \quad b = 4\lambda/3$$

und

$$M_{mn}(\lambda) = \frac{1}{\pi^2} \iint \frac{e^{-\lambda(r_1+r_2)} r_1^m r_2^n}{|r_1 - r_2|} dv_1 dv_2.$$

Wenn man die Integrale $M_{mn}(\lambda)$ berechnet, bekommt man

$$\begin{aligned} I_{00}(\lambda) &= 20/\lambda^5, & M_{22}(\lambda) &= 1674/\lambda^9, & M_{44}(\lambda) &= 1\,070\,550/\lambda^{13}, \\ I_{02}(\lambda) &= 168/\lambda^7, & M_{24}(\lambda) &= 40\,590/\lambda^{11}, & M_{46}(\lambda) &= 51\,521\,400/\lambda^{15}, \\ I_{04}(\lambda) &= 3690/\lambda^9, & M_{26}(\lambda) &= 1\,842\,750/\lambda^{13}, & M_{66}(\lambda) &= 2\,612\,891\,925/\lambda^{17}, \\ I_{06}(\lambda) &= 159\,390/\lambda^{11}, \end{aligned}$$

LITERATUR

- C. F. v. WEIZSÄCKER, ZS. f. Phys., **96**, 431, 1935.
 P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **3**, 127, 1953.
 F. HUND, ZS. f. Phys., **77**, 12, 1932.
 J. W. SHELDON, Phys. Rev., **99**, 1291, 1955.
 H. HELLMANN, Einführung in die Quantenchemie S. 16, Franz Deuticke, Leipzig und Wien, 1937.
 Bezüglich der Bezeichnungen vgl. man 2.
 M. KOTANI, A. AMEMIYA u. T. SIMOSE, Proc. Phys. Math. Soc. Japan **20**, Extra No. 1, 1938.

КОРРЕКЦИЯ НЕОДНОРОДНОСТИ ВЕЙЦЕККЕРА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЫ

В. КОЛОС

Резюме

В работе показана на примере молекулы N_2 важность коррекции Вейцеккера кинетической энергии молекул. При расчетах энергии молекулы N_2 и атома N применялся способ Ритца, с коррекцией Вейцеккера и без нее, с двумя вариационными параметрами в функции плотности электронов. Хотя связи не получается ни в первом ни во втором случае, тем не менее энергия отталкивания окажется гораздо меньше в случае учета коррекции Вейцеккера, чем без ее применения. Принимая во внимание результаты Сельдона, из вышесказанного следует, что учет коррекции Вейцеккера может привести к устойчивой молекуле.



ON THE DEDUCTION OF THE DIRAC-FOCK-PODOLSKI EQUATIONS FROM THE QUANTUM THEORY OF FIELDS*

By
K. L. NAGY

INSTITUTE FOR THEORETICAL PHYSICS OF ROLAND EÖTVÖS UNIVERSITY, BUDAPEST

(Received 12. XI. 1955)

It is well known that TOMONAGA constructed the relativistically invariant equation of motion of the interacting fields in analogy with the multiple time theory of DIRAC, FOCK and PODOLSKI [2]. M. GÜNTHER [3] showed first that one can deduce these equations (in the following the D. F. P. equations) from TOMONAGA's equation. Now we derive — using a simple configuration-space-method — the corresponding D. F. P. equation from the equation of motion of the fields obtained by J. SCHWINGER [4] after eliminating the scalar and longitudinal parts of the electromagnetic field.

According to SCHWINGER, the equation of motion of the fields reads either

$$i\hbar c \frac{\delta |\sigma\rangle}{\delta \sigma(x)} = - \frac{1}{c} j_\mu(x) A_\mu(x) |\sigma\rangle \quad (1)$$

together with the condition

$$\left[\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} - \int_{\sigma} D(x-x') \frac{1}{c} j_\mu(x') d\sigma_\mu(x') \right] |\sigma\rangle = 0, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} i\hbar c \frac{\delta |\sigma\rangle'}{\delta \sigma(x)} = & - \left[\frac{1}{c} j'_\mu(x) \mathfrak{A}'_\mu(x) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{c^2} \int_{\sigma} \partial_\mu(x-x') j'_\mu(x) j'_\lambda(x') d\sigma_\lambda(x') \right] |\sigma\rangle = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

which is obtained from equation (1) and (2) after decomposing A_μ as follows

$$A_\mu = n_\mu n_\nu \frac{\partial}{\partial x_\nu} A - \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} + n_\mu n_\nu \frac{\partial}{\partial x_\nu} \right) A' + \mathfrak{A}_\mu; \quad n_\mu^2 = 1, \quad n \text{ time-like} \quad (4)$$

* This note, being part of the author's more extensive investigations on the subject appears only because a recent publication [1] deals with a similar problem.

and after the transformation

$$|\sigma\rangle' = e^{iG[\sigma]} |\sigma\rangle, \quad 0' = e^{iG[\sigma]} 0 e^{-iG[\sigma]},$$

$$G[\sigma] = \frac{1}{\hbar c^2} \int_{\sigma} j'_\mu(x) A'(x) d\sigma_\mu(x). \quad (1)$$

Here $j'_\mu = j_\mu = iec \bar{\psi} \gamma_\mu \psi$, $\mathcal{A}'_\mu = \mathcal{A}_\mu$,

$$\vartheta_\mu(x) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \mathcal{D}(x) + n_\mu n_\nu \frac{\partial}{\partial x_\nu} \mathcal{D}(x),$$

$$\square \mathcal{D}(x) = 0, \quad (2)$$

$$\left(n_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right)^2 \mathcal{D}(x) = D(x);$$

we use the notations of SCHWINGER for the rest. From definition (6) we easily get in particular

$$\vartheta_i(x) = \frac{1}{8\pi} \frac{ctx_i}{(x_i^2)^{3/2}}, \quad \vartheta_4(x) = \frac{i}{8\pi} \frac{1}{(x_i^2)^{1/2}}, \quad \text{if } n = (0, 0, 0, i), \quad (3)$$

$$\vartheta_\mu(x) = \frac{1}{8\pi} \frac{1}{(x_\mu^2)^{1/2}} n_\mu, \quad \text{if } n \text{ is perpendicular to the } \sigma \text{ (here plane)} \quad (4)$$

and x is a space-like vector.

Let us now expand $|\sigma\rangle$ as superposition of a special system of state vectors. In order to obtain such a system let us suppose that the Dirac field has a state (vacuum) with the property:

$$\psi(x) |0\rangle = 0, \quad \langle 0 | 0 \rangle = 1. \quad (5)$$

Using this vacuum state we define the following state vectors:

$$|x_1, \dots, x_n\rangle = (n!)^{-1/2} \bar{\psi}(x_n) \dots \bar{\psi}(x_1) |0\rangle. \quad (6)$$

From the anticommutation relations of $\psi(x)$ and also from the property of the

angular function $S(x)$ we easily find that the $\overline{|x_1, \dots, x_n\rangle} > -s$ are eigenvectors of the operators

$$N[\sigma] = i \int_{\sigma} \bar{\psi}(x) \gamma_{\mu} \psi(x) d\sigma_{\mu}; \frac{\delta N}{\delta \sigma(x)} = 0 \quad \text{the particle number operator, (11)}$$

$$X_{\nu}[\sigma] = i \int_{\sigma} x_{\nu} \bar{\psi}(x) \gamma_{\mu} \psi(x) d\sigma_{\mu}; \frac{\delta X_{\nu}}{\delta \sigma(x)} = \frac{1}{ec} j_{\nu} \quad \text{the centre of mass operator (12)}$$

having the eigenvalues n and $x_{1,\nu} + \dots + x_{n\nu}$, respectively. Thus as the unit operator for every $\overline{|x_1 \dots x_n\rangle}$ and also for their bras is

$$\sum_n i^n \int_{\sigma} \dots \int \overline{|x_1, \dots, x_n\rangle} \prod_{\mu i}^n \gamma_{\mu i} d\sigma_{\mu i}(x_i) \langle x_1, \dots, x_n|,$$

we have

$$|\sigma\rangle = \sum_n i^n \int_{\sigma} \dots \int \overline{|x_1, \dots, x_n\rangle} \prod_{\mu i}^n \gamma_{\mu i} d\sigma_{\mu i}(x_i) \varphi(x_1, \dots, x_n) \rangle_P, \quad (13)$$

where $\varphi(x_1, \dots, x_n) \rangle_P = \langle x_1, \dots, x_n | \sigma \rangle$ is obviously antisymmetric in the x_i -s. Here \rangle_P indicates that φ is a state vector with respect to the electromagnetic (photon) field.

We note that from the relation $[F(x), P_{\nu}] = -i\hbar \partial_{\nu} F(x)$ we easily obtain

$$[X_{\mu}, P_{\nu}] = -\frac{\hbar}{i} N \delta_{\mu\nu} + \hbar \int_{\sigma} \frac{\partial}{\partial x_{\nu}} (x_{\mu} \bar{\psi}(x) \gamma_{\nu} \psi(x)) d\sigma_{\nu}(x). \quad (14)$$

In the special case $\sigma \rightarrow t = \text{const}$ these have the following form:

$$[X_{\mu}, P_j] = -\frac{\hbar}{i} N \delta_{\mu j}, \quad [X_i, P_4] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_4} X_i, \\ [X_4, P_4] = 0.$$

Now using the state vector (13) from equation (1) and (2) we get

$$\left[\gamma_{i,\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x_{i,\mu}} - \frac{ie}{\hbar c} A_{\mu}(x_i) \right) + \kappa \right] \varphi(x_1, \dots, x_n) \rangle_P = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (15) \\ \left[\frac{\partial A_{\mu}}{\partial x_{\mu}} - e \sum_i D(x - x_i) \right] \varphi(x_1, \dots, x_n) \rangle_P = 0.$$

Similarly we obtain from equation (3) the modified D. F. P. equations :

$$\left[\gamma_{i,\mu} \left(\frac{\partial}{\partial x_{i,\mu}} - \frac{ie}{\hbar c} \mathfrak{A}_\mu(x_i) - \frac{ie^2}{\hbar c} \sum_j \partial_\mu(x_i - x_j) \right) + \kappa \right] \varphi(x_1, \dots, x_n) >_P = 0$$

$$i = 1, 2, \dots, n.$$

Substituting ϑ specially from equation (7) into (16) these equations agree completely with the form of the D. F. P. equation when from A_μ its Coulomb part is eliminated (see e. g. [5] p. 152). With the λ -limiting process one can naturally eliminate here also the self-energy part $\vartheta(x_i - x_i)$.

Finally we note that in case of the electromagnetic field the analogous equations to (15) are (σ' is earlier than σ)

$$\square_i \varphi(y_1, \dots, y_m) >_D = - \frac{1}{c \sqrt{m}} j_\mu^{(+)}(y_i) \varphi(y_1, \dots, y_{i-1}, y_{i+1}, \dots, y_m) >_D$$

$$- \frac{1}{i \hbar c^2} \sqrt{m+1} \square_i \int_{-\infty}^{\sigma} j_\mu(x') \int_{\sigma'}^{\sigma} \dots \int_{\sigma'} (m!)^{-1} \sum_P D^{(+)}(y_1 - y'_a) \dots D^{(+)}(y_m - y'_m)$$

$$\Pi^m \left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial y'_{i,\nu_i}} - \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial y'_{i,\nu_i}} \right) d\sigma'_{\nu_i}(y'_i) \varphi(x', y'_1, \dots, y'_m) >_D dx', \quad \begin{matrix} i = 1, 2, \dots, m \\ m = 1, 2, \dots \end{matrix}$$

together with the conditions (using indefinite metric these conditions are a matter of fact appropriately modified) :

$$\frac{i \hbar c}{\sqrt{m}} \frac{\partial}{\partial x_{\mu_j}} \sum_{j=1}^m D^{(+)}(y_j - x) \varphi(y_1, \dots, y_{j-1}, y_{j+1}, \dots, y_m) >_D -$$

$$- \sqrt{m+1} \frac{\partial}{\partial x_{\mu'_j}} \sum_{j=1}^{m+1} \int_{\sigma} D^{(+)}(x - y'_j) \left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial y'_{j,\nu}} - \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial y'_{j,\nu}} \right) \times$$

$$\times d\sigma_{\nu}(y'_j) \varphi(y_1, \dots, y'_j, \dots, y_m) >_D -$$

$$- \int_{\sigma} D(x - x') \frac{1}{2} j_\mu(x') d\sigma_\mu(x') \varphi(y_1, \dots, y_m) >_D = 0,$$

where (cf. [6])

$$\varphi(y_1, \dots, y_m) >_D = \langle y_1, \dots, y_m | \sigma \rangle$$

$$\langle y_1, \dots, y_m | = (m!)^{-1/2} P < 0 | A^{(+)}(y_m) \dots A^{(+)}(y_1);$$

$$A^{(+)} | 0 \rangle_P = 0, \quad P < 0 | 0 \rangle_P = 1.$$

The author is indebted to Dr. G. MARX for many valuable discussions.

REFERENCES

1. P. BOCCHERI and A. LOINGER, *Nuovo Cimento*, **2**, 314, 1955.
2. P. DIRAC, V. FOCK and B. PODOLSKI, *Phys. ZS. Sovjetunion*, **2**, 468, 1932.
3. M. GÜNTHER, *Phys. Rev.*, **88**, 1411, 1952.
4. J. SCHWINGER, *Phys. Rev.*, **74**, 439, 1948.
5. G. WENTZEL, *Einführung in die Quantentheorie der Wellenfelder*. F. Deuticke, Wien, 1943.
6. W. KROLIKOWSKI, *Acta Phys. Polon.*, **14**, 197, 1955.



DER EINFLUSS DES KORRELATIONSFAKTORS ($1 + pr_{12}$) AUF DIE BERECHNUNGEN DES GRUND- ZUSTANDES DES WASSERSTOFFMOLEKÜLS

Von

F. BERENCZ

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER UNIVERSITÄT, SZEGED

(Eingegangen: 28. XI. 1955)

Diese Arbeit untersucht, wie die Berücksichtigung des Korrelationsfaktors ($1 + pr_{12}$) die Berechnungen des Grundzustandes des Wasserstoffmoleküls beeinflusst, wenn

1. die Heitler—Londonsche Eigenfunktion [1] der Gestalt

$$\Psi = N [\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_b(1) \psi_a(2)] \equiv N\varphi.$$

2. die Hund—Mullikensche Eigenfunktion [1] der Gestalt

$$\begin{aligned} \Psi &= N [\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_b(1) \psi_a(2) + \psi_a(1) \psi_a(2) + \psi_b(1) \psi_b(2)] \equiv \\ &\equiv N(\varphi + \chi), \end{aligned}$$

WO

$$\chi = \psi_a(1) \psi_a(2) + \psi_b(1) \psi_b(2)$$

st, und

3. die durch den Variationsparameter κ modifizierte Hund—Mullikensche Eigenfunktion [1] der Gestalt

$$\begin{aligned} \Psi &= N \{ \psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_b(1) \psi_a(2) + \kappa [\psi_a(1) \psi_a(2) + \psi_b(1) \psi_b(2)] \} = \\ &= N(\varphi + \kappa\chi) \end{aligned}$$

durch den Korrelationsfaktor ($1 + pr_{12}$) erweitert wird.

Die neuen Eigenfunktionen sind also:

- 1) $\Psi = N\varphi(1 + pr_{12})$,
- 2) $\Psi = N(\varphi + \chi)(1 + pr_{12})$,
- 3) $\Psi = N(\varphi + \kappa\chi)(1 + pr_{12})$.

ψ_a und ψ_b bezeichnen die Eigenfunktionen für den (1s)-Grundzustand des Wasserstoffatoms, wobei sich ψ_a auf das Atom mit dem Kern a und ψ_b auf

das Atom mit dem Kern b bezieht; r_{12} bezeichnet die gegenseitige Entfernung der beiden Elektronen und p einen Variationsparameter. N ist ein Normierungsfaktor.

Die Resultate, die man mit den oben besprochenen sechs Eigenfunktionen auf Grund des Variationsverfahrens erzielt hat, sind in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

Verfasser	Eigenfunktion	D eV	$R\text{\AA}$	z	α	P
WANG [2]	$\psi = N\varphi$	3,76	0,76	1,116	—	—
Diese Arbeit	$\psi = N\varphi(1+pr_{12})$	3,93	0,72	1,188	—	0,5
WEINBAUM [3]	$\psi = N(\varphi + \alpha)$	3,47	0,73	1,193	—	—
FROST-BRAUNSTEIN [4]	$\psi = N(\varphi + \chi) (1+pr_{12})$	4,11	0,71	1,285	—	0,2
WEINBAUM [5]	$\psi = N(\varphi + \alpha\chi)$	4,—	0,77	1,193	0,256	—
BERENZ [6]	$\psi = N(\varphi + \alpha\chi) (1+pr)$	4,14	0,71	1,248	0,356	0,0

Aus der Tabelle ist ersichtlich, dass die Berücksichtigung des Korrelationsfaktors $(1 + pr_{12})$ bei der Hund—Mullikenschen Eigenfunktion die grösste Dissoziationsenergiekorrektur gibt. In diesem Falle ist die Grösse der Verbesserung 0,64 eV, während in den anderen zwei Fällen dieselbe nur 0,17 eV bzw. 0,— eV beträgt.

Weiterhin soll geprüft werden, warum die Erweiterung der Eigenfunktion durch den Korrelationsfaktor $(1 + pr_{12})$ gerade bei der Hund—Mullikenschen Eigenfunktion die grösste Dissoziationsenergiekorrektur gibt. Zu diesem Zweck soll die ursprüngliche Korrelation der Elektronen in den oben besprochenen drei Eigenfunktionen untersucht werden.

In der Heitler—Londonschen Eigenfunktion kommt die Korrelation der Elektronen dadurch zum Ausdruck, dass der Wert der Funktion in jener Konfiguration grösser ist, in der sich die Elektronen bei den verschiedenen Kernen befinden, als in derjenigen, in der sich die beiden Elektronen bei demselben Kern befinden [7]. Dass diese Korrelation der Elektronen in der Heitler—Londonschen Eigenfunktion wirklich besteht, wurde von DAVIES so nachgewiesen, dass er eine Konfiguration annahm, in welcher sich das erste Elektron beim Kern a befindet, d. h.

$$r_{a1} < r_{b1},$$

zur selben Zeit kann sich das zweite Elektron entweder beim Kern a oder b befinden, d. h.

$$r_{a2} < r_{b2}, \quad \text{bzw.} \quad r_{a2} > r_{b2};$$

man bewies er durch eine einfache Extremrechnung, dass die letzte Konfiguration mit grösserer Wahrscheinlichkeit auftritt als die erste.

Demgegenüber kommt in der Hund—Mullikenschen Eigenfunktion gar keine Korrelation der Elektronen vor. Man kann nämlich die Hund—Mullikensche Funktion als Gesamtelektroneigenfunktion auf Grund der Methode der Molekül-Bahn als Produkt der Einelektroneigenfunktion in der Gestalt

$$\psi_1 = \psi_a(1) + \psi_b(1),$$

$$\psi_2 = \psi_a(2) + \psi_b(2)$$

darstellen. Die Methode der Molekül-Bahn nimmt aber an, dass zwischen den Elektronen keine Wechselwirkung vorhanden ist; folglich kann in der Hund—Mullikenschen Eigenfunktion keine Korrelation der Elektronen bestehen.

Ganz anders ist die Lage im Falle der durch den Variationsparameter modifizierten Hund—Mullikenschen Eigenfunktion. In dieser Näherungsfunktion ist die Korrelation der Elektronen wieder vorhanden. Wenn nämlich die Elektronen sich voneinander unabhängig bewegen würden, d. h. wenn sie sich wegen ihrer Wechselwirkung gegenseitig nicht abstossen würden, so hätten sie zwei Konfigurationen, in denen sich die Elektronen bei demselben Kern oder bei verschiedenen Kernen befinden, dieselbe Wahrscheinlichkeit. Wegen der Wechselwirkung der Elektronen wird aber die Wahrscheinlichkeit jener Elektronenverteilung kleiner werden, bei der sich beide Elektronen bei demselben Kern befinden, und so nimmt das Gewicht der Strukturen $H_a^+ - H_b^-$ und $H_b^+ - H_a^-$ ab. Diese Tatsache kommt in der Näherungsfunktion dadurch zum Ausdruck, dass der Wert κ zwischen 0 und 1 fällt.

Auf Grund der vorangehenden Untersuchungen ist es klar, dass von den oben erwähnten drei Eigenfunktionen nur in der Hund—Mullikenschen keine Korrelation der Elektronen ursprünglich vorhanden war. Wenn man folglich die erwähnten drei Eigenfunktionen durch den Korrelationsfaktor ($1 + pr_{12}$) erweitert, so muss offenbar im Falle der Hund—Mullikenschen Eigenfunktion die grösste Dissoziationsenergiekorrektur erhalten werden, was auch durch die Rechnungen vollkommen bestätigt wird.

Damit erhalten wir zugleich eine Anleitung Eigenfunktionen zu konstruieren, in welchen auch der Korrelationsfaktor vorkommt. Von den Eigenfunktionen, die die beste Dissoziationsenergie liefern, ist jene auszuwählen, in welcher gar keine Korrelation der Elektronen vorhanden ist; diese Näherungsfunktion ist durch den Korrelationsfaktor zu erweitern, da dadurch eine wesentliche Energiekorrektur entsteht.

LITERATUR

1. P. GOMBÁS, Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, Birkhäuser, Basel, 1950.
2. S. C. WANG, Phys. Rev., **31**, 579, 1928.
3. L. PAULING und E. B. WILSON, Introduction to Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York, 1935.
4. A. A. FROST und J. BRAUNSTEIN, J. Chem. Phys., **19**, 1133, 1951.
5. S. WEINBAUM, J. Chem. Phys., **1**, 593, 1953.
6. F. BERENCZ, Acta Phys. Hung., **4**, 149, 1954.
7. D. W. DAVIES, Thesis, Oxford, 1954.

THEORY OF ELECTROLUMINESCENCE*

By

E. NAGY

RESEARCH INSTITUTE FOR TELECOMMUNICATION INDUSTRY, BUDAPEST

(Received 1. XII. 1955)

In 1936 DESTRIAU [1] observed that luminescent materials under a strong alternating electric field (some 10 000 V/cm) fluoresce even without any excitation. The original theory proposed by Destriau explains this phenomenon by the acceleration of the electrons in the conduction band and the subsequent transfer of their energy to the luminescent centres [2]. It may easily be shown that to gain an energy $h\nu$ from the electric field E , the electron must be accelerated along a distance l , so that $qEl = h\nu$. The number of electrons having a free path greater than l is given by $N = c \exp(-l/l_0)$, where l_0 is the mean free path of the electrons. The emitted light therefore, being proportional to the number of electrons of sufficient energy, is given by: $N = c \cdot \exp(-h\nu/qEl_0)$.

This derivation, by supposing a free path independent of the field, runs entirely parallel to Lorentz's derivation of the electrical resistivity of metals, allowing namely only an insignificant perturbation of the distribution of electrons in the velocity space due to the electric field. The validity of this assumption is, however, dependent on the magnitude of qEl/kT which for metals is approximately 10^{-5} , for semiconductors, however, it may be well above unity. The consistent application of Lorentz's assumptions would exclude any change in the radial part of the distribution in the velocity space, causing an electroluminescence independent of the field.

A new theory is proposed here based on a more precise determination of the relaxation time. All interactions between the electron in the conduction band and the lattice defects may be characterized by a relaxation time, in case of the simultaneous occurrence of several lattice defects, the reciprocals of the relaxation times having to be summed over [3]. In the present case the following processes are operative: Interaction with the thermal vibrations of the crystal, for polar crystals (as for ZnS), interaction with the optical vibrations of the crystal and scattering by impurity ions. The scattering by neutral impurities

* Extract of a dissertation for the partial fulfilment of the requirements for the degree of Doctor of Physical Sciences.

and the energy transfer to luminescent centres are here neglected owing to their relatively smaller contributions. The relaxation times for the three aforementioned processes are the following [3], [4]:

$$\frac{1}{\tau_{th}} = \frac{4q}{3n^2 m \mu_0}, \quad \frac{1}{\tau_{ion}} = \frac{4q}{3n^2 m \mu_{cw}}, \quad \frac{1}{\tau_{op}} = \frac{qE}{(mh\nu_{op})^{\frac{1}{2}}}.$$

Here m denotes the mass of the electron, μ_0 and μ_{cw} the mobilities determined only by thermal scattering, resp. by scattering by the ions and ν_{op} a characteristic frequency of the optical vibrations. From these we get

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_0} + \frac{E}{v_{op}} + \frac{1}{\mu_{cw}}, \quad \text{where} \quad v_{op} = \frac{4}{3} \left(\frac{h\nu_{op}}{\pi m} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1)$$

(The above expressions are valid only, when the electrons obey a Maxwell-Boltzmann distribution in the conduction band, which may be safely assumed for most semiconductors.)

The exact solution of our problem would naturally necessitate the solving of Boltzmann's transport equation in strong fields, which has never been attempted owing to formidable mathematical difficulties. In discussing the deviations from Ohm's law for germanium, SHOCKLEY employed the approximation [4], that the Maxwell-Boltzmann distribution of the electrons is valid also in the strong field, not, however, for the lattice temperature T , but for a higher electron temperature (T_e). Using the same relatively rough picture let us suppose that the electron gas has such a temperature T_e , where the interaction with the thermal vibrations of the lattice alone is just as great as all interactions together at the lower temperature T . If the electron gas is at a higher temperature than the lattice, then the velocity of the electrons and thereby the number of collisions in unit time increases with the square root of the ratio of temperatures: the mobility decreasing thereby according to the same law. If we put therefore $T_e/T = y^2$, then $y\mu = \mu_0$, i. e.

$$y = 1 + \frac{\mu_0}{\mu_{cw}} + \frac{\mu_0}{v_{op}} E. \quad (2)$$

We may remark here that eq. (2) describes the deviations from Ohm's law for germanium quite well.

The electroluminescent light is proportional to the number of electrons having at the temperature T_e an energy greater than $h\nu$. The value so determined is in a first approximation

$$F = c \cdot \exp. (-\beta/y^2), \quad \text{where} \quad \beta = h\nu/kT. \quad (3)$$

Combining eqs. (2) and (3) we get the field dependence of the electroluminescence.

For a comparison of our theory with the experiment only ROBERTS' [5] data are available. Fig. 1 shows the field dependence of electroluminescence, with v_{op} supposed to be 10^7 cm/sec, the mobilities selected so as to give the best straight line. The mobilities so determined were $\mu_0 = 610$ cm²/Vsec and $\mu_{cw} = 380$ cm²/Vsec, giving for the effective mobility of ZnS in low fields $\mu = \mu_0 \mu_{cw} / (\mu_0 + \mu_{cw}) = 235$ cm²/Vsec. The number of ionized atoms may be determined from the explicit Conwell—Weisskopf formula, which gives for the present case $4 \cdot 10^{15}$. All the above values are quite probable.

It is well known that by increasing the frequency of the field the spectrum of electroluminescence is shifted towards greater energies. A new band appears

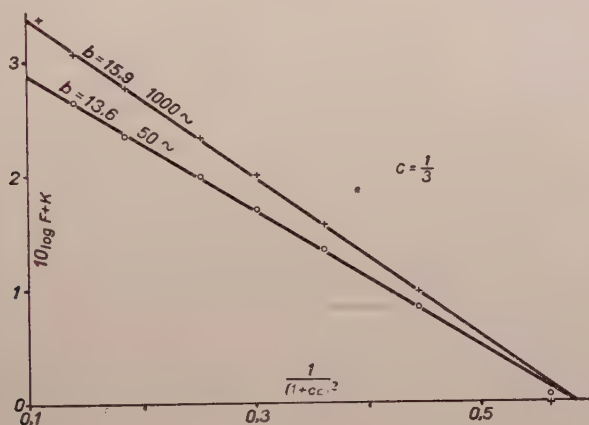


Fig. 1

at 2.68 eV, which is predominant over the band at 2.30 eV appearing at low frequencies. This means that the slope for 1000 cycles/sec must be 1.17 times greater than for 50 cycles/sec. This expectation is accurately fulfilled, as can be seen in Fig. 1.

The above calculations are limited in a strict sense to direct current (without space charges), for alternating current one ought to have averaged over the time. The very rapid variation of the light with the field ensures, however, that the greatest part of the light is generated near the voltage maximum. It explains also, why the electroluminescent light is proportional to field frequency up to the limit of saturation.

The electrons accelerated in the conduction band cannot originate in that place of the crystal, where the luminescent transition takes place. This follows from the principle of detailed balancing, the product of the number of electrons and holes being dependent only on gap width and temperature. From this it is evident that the electrons must originate near the surface of

the crystal, whence the electric field sweeps them into the interior of the crystal which is deficient in electrons but abundant in holes, thereby making possible recombination by fluorescence.

REFERENCES

1. G. DESTRIAU, J. Chim. Phys., **33**, 587, 1936.
2. D. CURIE, J. Phys. Rad., **14**, 510, 673, 1953.
3. A. H. WILSON, The Theory of Metals, 2nd ed., Cambridge, 1954.
4. W. SHOCKLEY, Bell System Techn. Journ., **30**, 990, 1951.
5. S. ROBERTS, J. Opt. Soc. Am., **42**, 850, 1952.

ÜBER DIE MÖGLICHKEIT DER NUTZBARMACHUNG DER ATOMENERGIE OHNE KETTENREAKTION

Von

K. SIMONYI

ZENTRALFORSCHUNGSINSTITUT FÜR PHYSIK DER UNGARISCHEN AKADEMIE
DER WISSENSCHAFTEN, BUDAPEST

(Eingegangen: 5. I. 1956)

Man kennt heute zwei Arten der makroskopischen Ausnutzung der Atomenergie: die sich auf Kernspaltung gründende Kettenreaktion und die bei sehr hoher Temperatur erfolgende Fusion. Letzterer Vorgang ist im Augenblick nur als Explosion, das bedeutet in nicht kontrollierbarer Form, bekannt.

Die Ausnützung dieser Erscheinung für eine fortlaufende Energieproduktion besitzt selbstverständlich aussergewöhnliche Wichtigkeit und sicherlich beschäftigen sich zahlreiche Forscher mit dieser Frage; doch sind — unseres Wissens nach — bis heute keinerlei Publikationen, ausser den einige Sätze enthaltenden, in Pressekommentaren publizierten Hinweisen erschienen, nicht einmal über die Richtung etwaiger Forschungen, abgesehen von einer mit einem Atomreaktor kombinierten Lösung [1]. Im nachstehenden möchten wir einige diesbezügliche Möglichkeiten zeigen, die vielleicht zur Förderung dieser Frage beitragen können.

Man pflegt zu betonen, dass man mittels Beschleunigungsanlagen keine ausnützbare Energie gewinnen kann, doch weist LAWRENCE in einer Presseerklärung darauf hin, dass die Beschleuniger für die Energieerzeugung Bedeutung gewinnen können. Untersuchen wir nunmehr diese Frage näher:

Laut Abb. 1 soll N_0 Teilchen durch eine Beschleunigungsanlage eine Energie $N_0 W_0$ in der Zeiteinheit erteilt werden mit einem Wirkungsgrad η_n . Es soll jedes dieser Teilchen mit einer Wahrscheinlichkeit v eine Kernreaktion hervorzurufen, bei der eine Energie W_r frei wird. Die hierdurch entstehende Wärme soll bei einem thermischen Wirkungsgrad η_t wieder in elektrische Energie zurückwandelt werden. Die Voraussetzung dafür, dass dieser Zyklus seinen eigenen Energieverbrauch ersetzen und überdies noch einem Verbraucher nutzbare Energie abgeben kann, lautet folgendermassen:

$$\eta_n \eta_t (N_0 W_0 + v N_0 W_r) = N_0 W_0,$$

also

$$v \frac{W_r}{W_0} \geq \frac{1}{\eta_n \eta_t} - 1.$$

Wenn man bedenkt, dass die Wahrscheinlichkeit eines Reaktionsprozesses im allgemeinen sehr gering ist — ungefähr 10^{-6} – 10^{-9} beträgt und W_r einen Wert von der Grössenordnung von 10 hat, ferner, dass die dem Ni entnommene Leistung im allgemeinen einige kW beträgt, während die Targetleistung nur einige Watt ausmacht, so erhalten wir auf der linken Seite einen Wert von 10^3 , es fehlt somit zur Energieerzeugung ein Faktor von 10^8 bis 10^{11} . Man pflegt deshalb zu sagen, dass eine Beschleunigungsanlage zur Energieerzeugung nicht geeignet ist. Wir möchten nun die Korrektionsmöglichkeit der einzelnen hier angeführten Faktoren untersuchen.

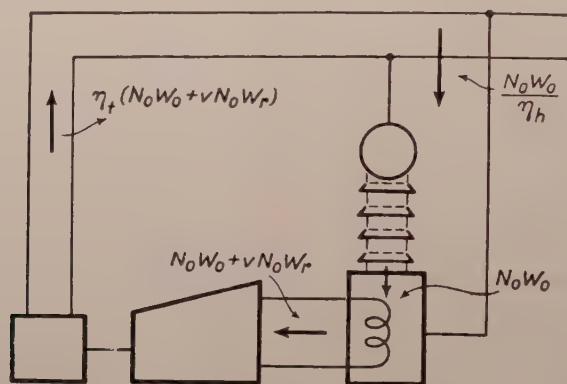


Abb. 1

Der geringe Wert von η_n ist in erster Reihe dem niedrigen Targetstrom und dem verhältnismässig verwickelten, viele Hilfsapparaturen — Pumpen, Ionenquellen etc. — benötigenden Aufbau der Beschleunigungsanlagen zuzuschreiben. Prinzipiell kann sich dieser Wirkungsgrad bei Hochspannungen und besonders bei hohen Stromstärken, durch die technische Vervollkommenung der Hilfsapparaturen, dem guten Wirkungsgrad der gewöhnlichen elektrischen Maschinen nähern. Da es sich hier um Erwägungen über Grössenordnung handelt und die Realisierbarkeit hoher Targetleistungen durch Lawrance bewiesen wurde, nehmen wir diesen Wirkungsgrad im nachfolgenden als $\eta_n =$

Der geringe Wert von v ergibt sich aus dem kleinen Wirkungsquerschnitt der Reaktionen. Auf Grund der augenblicklich zur Verfügung stehenden Angaben scheint es, dass die linke Seite der Gleichung (1) ihren grössten Wert bei der Reaktion $T^3(d,n)He^4$ erreicht [2]. Aus der Reichweite des Deuteriums in Tritiumgas bzw. aus dem Wirkungsquerschnitt der Reaktion bei primären Teilchen von einer Energie von 0,2 MeV ergibt sich

$$v \sim 10^{-4} - 10^{-5},$$

wogegen der Wert von W_r/W_0 aufgerundet 10^2 beträgt. Der Wert der linken

Reichweite ergibt somit ca. 10^{-2} — 10^{-3} . Anstatt der oben erwähnten 8—10 Grössenordnungen bedeutet dies nur mehr 2—3 Grössenordnungen.

Soviel kann jedenfalls festgestellt werden, dass die Wärmeleistung des Targets infolge der Kernreaktion fast um 1%, also um einen makroskopisch gut nachweisbaren Wert steigt.

Da die spezifische Ionisation bei kleinen Energiewerten stark zunimmt, durchläuft ein Teilchen eine verhältnismässig kleine Strecke, und es besteht eine geringe Wahrscheinlichkeit, dass es bei niedrigen Energien eine Reaktion erzeugt. Demnach ist ein Zurückgewinnen der angelegten Energie mit höherem Prozentsatz bei Reaktionen, deren Wirkungsquerschnitt bei grossen Energien zunimmt, zu erwarten.

Lassen wir, wie bei der vorangehenden Schätzung, den Energieverlust durch die elastischen Streuung der Ionen an Atomkernen unbeachtet. Es gibt also nur einen einzigen Energieverlust: die Wechselwirkung mit den Elektronen der Targetatome; dieser Energieverlust bestimmt die Reichweite. Wenn diese Reichweite bei gegebener Teilchenenergie beliebig vergrössert werden könnte, so würde ein jedes Geschoss die Möglichkeit zur Erzeugung eines Kernprozesses erhalten. Gibt es ein Mittel zur wirksamen Vergrösserung der Reichweite? Um diese Frage beantworten zu können, untersuchen wir eine andere Methode der Energieübertragung.

Erteilen wir den Teilchen impulsweise grosse Energien dadurch, dass wir einen Kondensator durch ein Gemisch von Deuterium und Tritium entladen. Aus der Strahlungsbilanz kann nach [4] die Folgerung gezogen werden, dass auf diese Weise nur wenige Grössenordnungen in der verfügbaren Leistung zur Erreichung der Gleichgewichtstemperatur der Reaktion (T—D) in irdischem Massstabe fehlen, besonders wenn man beachtet, dass das Stephan-Boltzmannsche Gesetz in diesem Fall sogar grössenordnungsmässig falsche Werte geben kann. Die Zahl der entstandenen Teilchen von maximaler Energie kann gerade durch den Kernprozess experimentell leicht kontrolliert werden.

Ähnliche, sehr starke, klassische Energiekonzentrationen können auch auf anderer Weise verwirklicht werden: z. B. mit Hilfe fokussierter Detonationswellen [3].

Obzwar diese Methoden keine unmittelbar verwertbare Zusatzenergie ergeben, so sind sie eventuell doch dazu geeignet, das Gastarget soweit zu ionisieren, dass in demselben die Reichweite der durch eine Beschleunigungsanlage eingeschossenen Teilchen stark zunimmt. So kann eventuell ein im Impulsbetrieb arbeitender Beschleuniger einem durch synchronisierte Impulse synchronisierten Gastarget eine ausnützbare Zusatzenergie abgeben.

Jede Methode, die zur Erhöhung der Reichweite führt, fördert natürlicherweise die Befreiung der Zusatzenergie; auch eine sehr grosse Stromstärke

der Beschleuniger kann vielleicht die nötige Vergrößerung der durchschnittlichen Reichweite des einzelnen Teilchens mitsichbringen.

Die praktische Nutzbarmachung der Atomenergie durch kontrollierbare Fusionsreaktion liegt vielleicht in ferner Zukunft. Die Beschäftigung mit diesen Fragen kann aber einen unmittelbaren Nutzen bringen. Es wird dadurch die Formulierung und Lösung zahlreicher *in sich* interessanter physikalischer Probleme gefördert.

Ich möchte hier den Kollegen danken, die an der Besprechung dieser Problems teilnahmen, vor allem G. KÁLMÁN, dessen Bemerkung ich benutzte.

LITERATUR

1. F. E. O'MEARA, Phys. Rev., **89**, 982, 1953.
2. W. R. ARNOLD et alii, Phys. Rev., **93**, 483, 1954.
3. J. THIBAUD et D. PERRIER, Nuovo Cimento, **8**, 705, 1951.
4. H. THIRRING, Nucleonics, **13**, 62, 1955.

THEORY OF APERTURE AERIALS BASED ON THE PROPERTIES OF ENTIRE FUNCTIONS OF THE EXPONENTIAL TYPE

By

R. KOVÁCS and L. SOLYMÁR

RESEARCH INSTITUTE OF TELECOMMUNICATION, BUDAPEST

(Presented by G. Bognár. — Received 26. VII. 1955)

Based upon the theory of entire functions of the exponential type familiar in mathematics, and assuming separable illumination functions, several problems concerning aerial systems are discussed. It is shown that radiation patterns which can be achieved with finite aperture dimensions belong to the W_1 class of functions. The construction of any arbitrary radiation pattern is reduced to a problem of approximations. The specified radiation pattern is represented as the limit of the series of W_1 functions convergent in the mean. It is further shown that an increase in the gain to above the classical level is of necessity associated with an increase in quality. A lower limit of quality at a given gain is determined. Finally, solutions of problems of approximation encountered in practical aerial design are presented.

The paper which is here submitted rests upon private communications of M. UZSOKY. Its sole object is to demonstrate the applicability of the properties of entire functions of the exponential type in approaches to the theory of aperture aerials. Another paper, on more general lines and solving a large number of practical problems, will soon be published by M. UZSOKY.

I. Introduction

The present paper falls into two parts: a physical part, and a mathematical one, with the necessary mathematical theorems and definitions contained in the Appendix. The physical part can be read independently, provided the reader assumes the validity of the mathematical theorems cited.

I/1. The radiation pattern

If the field is zero for any point of an infinite plane except a rectangular aperture, then, assuming a separable illumination function, the radiation pattern is given by the familiar formula [1]

$$g(u, v) = \int_{-1}^1 f(x)e^{jux}dx \int_{-1}^1 h(y)e^{jvy}dy, \quad (1)$$

where $f(x) \cdot h(y)$ stands for the illumination function.

$$x = \frac{2\xi}{a}, \quad y = \frac{2\eta}{b}.$$

$$u = \frac{\pi a}{\lambda} \sin \Theta \cos \Phi = u_0 \sin \Theta \cos \Phi,$$

$$v = \frac{\pi b}{\lambda} \sin \Theta \sin \Phi = v_0 \sin \Theta \sin \Phi.$$

The quantities ξ , η , Φ and Θ are defined in Fig. 1.

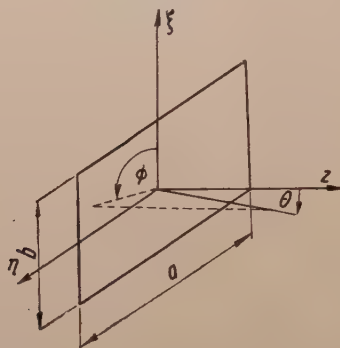


Fig. 1

Let us discuss the situation for the main planes:

For the plane xz

$$\Phi = 0, \quad u = u_0 \sin \Theta, \quad v = 0,$$

$$\Phi = 180^\circ, \quad u = -u_0 \sin \Theta, \quad v = 0,$$

which means that the radiation pattern depends solely on the distribution along x . Similarly, it can be shown that in the plane yz it is only the distribution of the field along y which is of effect.

Since in practice only the polar diagrams for the main planes are generally prescribed, the original problem can be reduced to a two-dimensional one characterized always by one of the factors in equation (1). Accordingly, the radiation pattern in the xz -plane is given by

$$g(u) = \int_{-1}^1 f(x) e^{iux} dx,$$

where $f(x)$ accounts for the variation of the electric field along x .

I/2. Separability of the gain

The gain is given, according to definition, by

$$G = \frac{p(\Theta, \Phi)_{\max}}{\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} p(\Theta, \Phi) \sin \Theta d\Theta d\Phi}, \quad (6)$$

where $p(\Theta, \Phi)$ denotes the power pattern. For the case of sharply directive aerials, expression (6), by the use of equations (3), assumes the form

$$G = \pi \frac{2u_0}{\int_{-u_0}^{u_0} p_a(u) du} \cdot \frac{2v_0}{\int_{-v_0}^{v_0} p_b(v) dv} = \pi G_a G_b, \quad (7)$$

where $p(u, v)$, the transform of $p(\Theta, \Phi)$, may be written as $p(u, v) = kp_a(u) \cdot p_b(v)$, the functions $p_a(u)$ and $p_b(v)$ having been normalized to unity. The quantities G_a and G_b are the gains for the main planes.

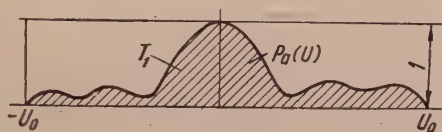


Fig. 2

As can be seen from Fig. 2, G_a permits the simple interpretation

$$\int_{-u_0}^{u_0} p_a(u) du,$$

i.e., the area under the curve gives the total radiated power. Were it desired to radiate the maximum power density in every direction, the output required would be $2u_0$. Consequently, G_a is given by the quotient of the two powers and the two areas, respectively.

In the following the radiation pattern in the xz plane only will be discussed, and the gain will be characterized by G_a .

$$G_a = \frac{2u_0}{\int_{-u_0}^{u_0} p_a(u) du} = \frac{2u_0}{T_1}. \quad (8)$$

I/3. Definition of quality

Quality is defined as the quotient of the reactant and real power. It has been shown [2, 3] that the reactant power is given approximately by the integral of the radiation pattern for the physically inadmissible regions. (The physical region is a segment of the u axis, $|u| \leq u_0$, i. e., where a real θ corresponds to u .) Assuming again the separability, and expressing quality by the product of the qualities of the main planes, we may write

$$Q = cQ_aQ_b,$$

where c is a proportionality constant, immaterial for the further discussion.

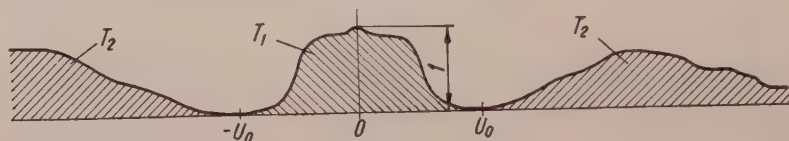


Fig. 3

Q_a , on the other hand, may be expressed by the radiation pattern of the power in the xz plane:

$$Q_a = \frac{\int_{-\infty}^{-u_0} p_a(u) du + \int_{u_0}^{\infty} p_a(u) du}{\int_{-u_0}^{u_0} p_a(u) du}.$$

Q_a is, then, given as the quotient of the two areas, briefly as

$$Q_a = \frac{T_2}{T_1}.$$

II. Aerial design

The problems encountered in aerial design fall into two principal classes:

(i) *Problems of analytical character*: Given the illumination function, find

- a) the radiation pattern,
- b) the gain,
- c) the quality, etc.

(ii) *Problems of the opposite kind*: Find the illumination function, being given

- a) the polar pattern, or
- b) the gain, and have a minimum Q , or
- c) the side-lobe attenuation, and have a maximum gain, etc.

In the present paper, some of the problems under (ii) will be dealt with theoretically. Basing ourselves upon the quantities given in the introduction and the mathematical theorems in the Appendix, the following aspects will be treated of, viz.:

1. Condition of ensuring radiation patterns.
2. Approximation of arbitrary radiation patterns.
3. Ensuring arbitrary gains; an example.
4. Phenomena associated with increased gain.
5. A lower limit of Q_a for a given G_a .
6. Approximation of a given radiation pattern by means of the convolution theorem in the interval of u ($-\infty, \infty$).
7. Approximation by interpolation.
8. Approximation of the power pattern.

II/1. Condition of ensuring radiation pattern

According to equation (5),

$$g(u) = \int_{-1}^1 f(x) e^{jux} dx = F[f(x)],$$

whence, on applying the Fourier transformation (see paragraph 1 in Appendix; hereinafter: cf. A/1) we have

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} g(u) e^{-jux} du, \quad (12)$$

where the constant factor $1/2\pi$ is suppressed).

The Fourier transform of $g(u)$, owing to its physical significance, is always existing, but in a general case the corresponding illumination function may assume non-vanishing values in the entire $(-\infty, \infty)$ interval. Accordingly, this kind of pattern would not be realizable except with infinite aperture dimensions. But as only finite apertures are at our disposal, we are to find an illumination function which is equal to zero except in the interval $(-1, 1)$. Such functions belong to class F_1 (cf. A/4). From the Wiener-Paley theorem (cf. A/11) it follows that the Fourier transform of class F_1 functions belongs to class W_1 (about functions of class W_1 cf. A/5, 6, 7, 10, 11 and 12). From this follows that the necessary and sufficient condition for the realizability of a radiation pattern is its occurrence in class W_1 .

II/2. Approximation of arbitrary radiation patterns

The general procedure is to find the illumination function to the prescribed radiation pattern. Is the latter a class W_1 function, the former is immediately obtainable by means of the Fourier transformation. With a different radiation pattern, there is no exact solution of the problem, and one must fall back on approximations. The mathematical derivations in the Appendix (cf. A/17 to A/21) reveal that if the prescribed radiation pattern is bounded and quadratically integrable, then it may be approximated in the mean by W_1 functions. The theorem is proved in two steps; first, we show that in a finite interval $\sin nu/nu$ can be evenly approximated by W_1 functions; thereafter, that the convolution of $\sin nu/u$ and $g(u)$ approximates $g(u)$ to any desired accuracy.

Accordingly, in principle, all the radiation patterns required from a practical point of view can be produced with finite aperture dimensions.

II/3. Ensuring arbitrary gains; an example

It follows from the preceding paragraph that radiation patterns of arbitrary gain can be approximated. It is now proposed to present a function, by which this is actually done. Let

$$g(u) = \frac{\sin nu}{nu}, \quad p(u) = \frac{\sin^2 nu}{n^2 u^2}.$$

This function gives arbitrary gains, provided n is large enough. From equation (8)

$$G_a = \frac{2u_0}{\int_{-u_0}^{u_0} p(u) du}.$$

It remains to be shown that

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-u_0}^{u_0} p(u) du = 0,$$

and this is done as follows:

$$\int_{-u_0}^{u_0} \frac{\sin^2 nu}{n^2 u^2} du = \frac{1}{n} \int_{-nu_0}^{nu_0} \frac{\sin^2 t}{t^2} dt \leq \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 t}{t^2} dt = \frac{\pi}{n}.$$

It can be seen that, with n great enough, the integral can be made arbitrarily small, and the gain arbitrarily large.

II/4. Phenomena associated with increased gain

Let us postulate great directional sharpness in the physically significant region and examine what consequences will then be encountered in regions outside it. Let $g(u)$ denote a realizable radiation pattern normalized to unity. Since

$$g(u) \in W_1$$

the Bernstein inequalities are valid (cf. A/6, 12). Here, only the first inequality is used, according to which

$$|g'(u)| \leq \sigma |\hat{g}(u)| \quad (\text{in this case } \sigma = 1),$$

where the circumflex denotes the peak value.

On increasing the gain, the function becomes ever steeper in the interval $-u_0, u_0$, that is, $|g'(u)|$ increases. This, however, means that at some point the value of $|g(u)|$ rises above $|g'(u)|$. Since, due to the normalization, the function cannot be greater than 1 in the physical region, it must exceed this value outside the physical interval. Therefore, the steeper the function is within the physical region, the larger values must it assume without it. Outside the physical region the area under the curve is proportional to Q_a , thus an increase in the gain is accompanied by an increase in the quality.

In this connection, an analogy may be pointed out, also from the field of telecommunication. For any circuit, the relation between the time dependence $f(t)$ and the frequency dependence $s(\omega)$ is known to be likewise given by a Fourier transformation. It is further known, that the greater the width of the pass band and the amplitude is, the better is the transfer of the steep part of the signal. If the pass band is between $-\sigma$ and $+\sigma$, and the peak amplitude $|\hat{f}(t)|$, then $|f'(t)|$ is proportional to σ and $|\hat{f}(t)|$. It can be seen that the Bernstein inequality is valid in this case, too.

Relation (12) also permits of inferences concerning the illumination function. If $g(u)$ assumes high values outside the physical region, that means that in the illumination function the high-frequency terms appear with a great weight, and so the illumination function oscillates rapidly in dependence on x . To sum up, great gain goes hand in hand with superior quality and wavelike illumination.

We are now in a position to define exactly the super-gain aerials, to which so much attention is being devoted in the literature. Super-gain aerials are aerials the radiation pattern of which assumes its maximum outside the physical region.

II/5. A lower limit of Q_a for a given G_a

With a view to achieving simplicity in computational technique, the minimum quality is sought not among W_1 class functions, but among functions of the wider $(1DM)_1$ class, to which belong all the functions fulfilling the Bernstein inequality. The $(1DM)_1$ class is obviously wider than the W_1 class, since the functions belonging to the latter have other conditions to obey as well (for details cf. A/9, 15, and 16). If, then, the minimum quality is to be found in class $(1DM)_1$, the minimum in W_1 is bound to be greater. For the subsequent calculations we need the radiation pattern of the power. Having shown that the realizable radiation patterns belong to W_1 , the corresponding power radiation patterns, according to A/13, belong to W_{2+} (positive functions of class W_2), where

$$W_{2+} \subset W_2 \subset (1DM)_2.$$

Our problem, therefore, is to find the minimum quality in class $(1DM)_2$ at a given gain. The gain, and thereby T_1 , being given, the problem to be solved is, according to (11),

$$\min Q_a = \min \left(\frac{T_2}{T_1} \right) = \frac{1}{T_1} \min T_2. \quad (1)$$

Introducing the parameter \hat{p} , where $\hat{p} = \max \{p\}$, we determine the minimum of T_2 for a fixed \hat{p} . Since

$$p \in (1DM)_2,$$

we get

$$\frac{p'}{2} \leq \hat{p} \quad (1)$$

and so

$$\frac{(\hat{p}')}{2} \leq \hat{p}.$$

The area, T_2 , outside the physical region is a minimum, when it is an isosceles triangle in shape, with the greatest possible slope, i. e., $2p$. In Fig. 1, $\operatorname{tg} \varphi = 2\hat{p}$, wherefore $T_2 = \frac{\hat{p}}{2}$.

Now we alter the parameter \hat{p} in order to make T_2 a minimum, i. e.,

$$\min Q_a = \frac{1}{2 T_1} \min \hat{p} = \frac{1}{4 T_1} \min (\hat{p}')$$

The value of T_1 being prescribed, we have a condition for (\hat{p}) . It has a minimum when T_1 is an isosceles triangle in shape and the slope of its side is exactly (\hat{p}) ; any deviation from this triangular form gives rise to a greater value of (\hat{p}) , owing to the fixed value of T_1 and the maximum. Since T_1 and (\hat{p}) are related,

$$T_1 = \frac{1}{(\hat{p})^2} \quad \text{and we have} \quad \min (\hat{p}) = \frac{1}{T_1},$$

which gives

$$\min Q_a = \frac{1}{4T_1} \min \hat{p} = \frac{1}{4T_1^2}. \quad (18)$$



Fig. 4

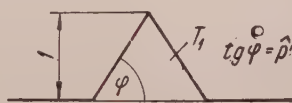


Fig. 5

Substituting the expression of gain from (8) into (18)

$$\min Q_a = \frac{G_a^2}{16 u_0^2}. \quad (19)$$

In case $p \in W_2$ this lower limit can obviously be bettered.

II/6. Approximation of a given radiation pattern by means of the convolution theorem in the interval $(-\infty, \infty)$

From the following treatment the super-gain aerials are excluded; in other words, uniformly zero value is prescribed outside the physical regions. Consequently, the mathematical problem confronting us is to approximate the radiation pattern function g_2 , for which

$$g_2 = 0, \quad \text{if} \quad |u| > u_0. \quad (20)$$

This problem we solve by means of the convolution theorem, making use of the fact that $g_1 \in W_1$ and g_2 is quadratically integrable. In this case (cf. A/17)

$$g_3 = g_1 * g_2 \in W_1.$$

We now have to determine the function g_1 which minimizes the squared deviations, i. e., which fulfills

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g_3 - g_2|^2 du = \min. \quad (21)$$

The super-gain character is here excluded by taking the limits of integration to extend from $-\infty$ to ∞ . Were the minimum squared deviation sought only in the $-u_0, u_0$ interval, disregarding the behaviour outside the physical regions, the minimum would tend towards zero, and the quality towards infinity. Let us introduce the following quantities

$$F[f_1] = g_1, \quad F[f_2] = g_2, \quad F[f_3] = g_3$$

and

$$F[f_1 \cdot f_2] = \frac{1}{2\pi} g_1 * g_2,$$

then

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |g_3 - g_2|^2 du &= 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |f_3 - f_2|^2 dx = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |f_1 f_2 - f_2|^2 dx = \\ &= 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |f_2|^2 |1 - f_1|^2 dx, \end{aligned} \quad (22)$$

where use has been made of the Parseval relation (cf. A/2).

Equation (22) clearly shows that the integral assumes its minimum when

$$f_1 = \begin{cases} 1, & |x| \leq 1, \\ 0, & |x| > 1. \end{cases}$$

From this it follows that

$$g_1 = F[f_1] = 2 \frac{\sin u}{u}.$$

Summarising: the minimum squared deviation is assured if the convolution of the given g_2 function is taken with $\sin u/u$.

II/7. Approximation by interpolation

The objective is to construct to a given g_2 function a $g_1 \in W_1$ function which agrees with g_2 at n prescribed points. In this, use is made of the following theorem (cf. A/18)

$$g_1(u) = \frac{\sin u}{u} \frac{P_n(u)}{Q_n(u)} \in W_1,$$

where $P_n(u)$ and $Q_n(u)$ are polynomials of the same order and the zeros of $Q_n(u)$

agree with the n zeros of $\sin u/u$ in the interval $|u| \leq \frac{n\pi}{2}$. Fixing the zeros of $Q_n(u)$, the function

$$\Psi_n(u) = \frac{\sin u}{uQ_n(u)}$$

is definite but for a constant factor. Now we get

$$g_1(u) = \Psi_n(u)P_n(u)$$

and postulate the agreement of g_1 and g_2 at the n prescribed points.

$$g_2(u_k) = \Psi_n(u_k)P_n(u_k) \quad (k = 1, 2, \dots, n).$$

From the last equation

$$P_n(u_k) = \frac{g_2(u_k)}{\Psi_n(u_k)} \quad (\Psi_n(u_k) \neq 0, \quad k = 1, 2, \dots, n),$$

which serves for the determination of $P_n(u)$.

This procedure has the disadvantage that it is difficult to find the illumination function. Another method of interpolation is therefore given here, which readily yields the Fourier transform.

The following form of the approximating function is assumed:

$$L_k(u) = \frac{\sin(u - k\pi)}{u - k\pi} \in W_1.$$

The values of $L_k(u)$ at the points $l\pi$ will be

$$L_k(l\pi) = \begin{cases} 1, & l = k, \\ 0, & l \neq k. \end{cases}$$

We prescribe the values of g_1 at the points $l\pi$ ($l = 1, 2, \dots, n$), i. e.,

$$g_1(l\pi) = g_2(l\pi).$$

Thus we get the approximating function:

$$g_1(u) = \sum_{k=1}^n g_2(k\pi) L_k(u).$$

The same approximation is applied by WOODWARD [5], making use of the well-known fact that a linear phase error at the aperture gives rise to a rotation of the radiation pattern.

Is this approximation found to be inadequate, it can be improved by prescribing further $u = u_1, u_2, \dots, u_m$ values. The new approximating function, agreeing exactly at $m + n$ points, will then be

$$g_1(u) = \sum_{k=1}^n g_2(k\pi) L_k(u) + \sum_{l=1}^{m+n} A_l L_l(u),$$

where $i\pi > u_0$ and the coefficients A_l are given by the following system of linear equations:

$$\begin{aligned} g_2(u_1) &= \sum_{l=1}^{m+i} A_l L_l(u_1) + \sum_{k=1}^n g_2(k\pi) L_k(u_1), \\ g_2(u_2) &= \sum_{l=1}^{m+i} A_l L_l(u_2) + \sum_{k=1}^n g_2(k\pi) L_k(u_2), \\ &\vdots \\ g_2(u_m) &= \sum_{l=1}^{m+i} A_l L_l(u_m) + \sum_{k=1}^n g_2(k\pi) L_k(u_m). \end{aligned}$$

To improve the approximation by prescribing additional points involves the disadvantage that the illumination function assumes an increasingly intricate character.

II/8. Approximation of the radiation pattern of power

Generally, the practical requirements are not for a radiation pattern of the electric or magnetic field, but only for a power pattern. In approximating the power pattern, we can construct an infinite number of field patterns belonging to it, and are thus enabled to select the one with the most favourable illumination function.

Since a $g(u)$ function belonging to W_1 has the property (cf. A/13)

$$g(u)g(u)^* = p(u) \in W_{2+},$$

the power patterns met with in practice belong to class W_{2+} .

However, the Fejér-Riesz theorem, generalized by Krein, states (cf. A/14) that any function

$$p(u) \in W_{2+}$$

can be expressed by some function $g(u)$ of W_1 in the following manner

$$g(u)g(u)^* = p(u).$$

Accordingly, if the prescribed power pattern does not belong to W_{2+} it can still be approximated by functions belonging to that class. The corresponding field patterns belong to W_1 , i. e., they are realizable.

The solution of this problem entails greater mathematical difficulties, in some less intricate cases it can nevertheless be successfully solved.

APPENDIX

Mathematical theorems and definitions

Theorems available in the literature are copied only, and reference is made to the source. All other theorems are proved.

1. Fourier transformation formulas

$$g(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{jux} dx ,$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g(u) e^{-jux} du .$$

Notation of the transformation

$$F[f(x)] = g(u) \quad \text{and} \quad F^{-1}[g(u)] = f(x) .$$

2. Parseval equality. The above functions obey

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) f^*(x) dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g(u) g^*(u) du .$$

3. Convolution theorem.

$$\text{If } F[f_1(x)] = g_1(u) \quad \text{and} \quad F[f_2(x)] = g_2(u) ,$$

$$g_1 * g_2 = 2\pi F[f_1 f_2] ,$$

$$g_1 * g_2 = \int_{-\infty}^{\infty} g_1(t) g_2(u-t) dt .$$

4. Class F_σ functions

$$\varphi(z) \in F_\sigma ,$$

$$\varphi(z) = 0 ,$$

case

$$|z| > \sigma$$

and

$$\varphi(z) \in L^2(-\sigma, \sigma) .$$

5. Class E_σ functions.

Two equivalent definitions are given.

$$\psi(z) \in E_\sigma.$$

a) If it is an entire transcendental function and

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\text{Max}_{|z|=r} \ln |\psi(z)|}{r} \leq \sigma.$$

b) If

$$\psi(z) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \frac{z^k}{k!}$$

and

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{|C_k|} \leq \sigma.$$

6. Class B_σ functions

$$\psi(z) \in B_\sigma \quad \text{if} \quad \psi(z) \in E_\sigma$$

and $\psi(z)$ is bounded on the real axis.

In respect of these functions the Bernstein inequalities are valid [4].

$$\text{I.} \quad |\psi'(z)| \leq \sigma |\hat{\psi}(z)|,$$

where

$$|\hat{\psi}(z)| = \sup_{z=\text{real}} |\psi(z)|.$$

$$\text{II.} \quad |\psi'(z)| \leq \sigma \sqrt{|\hat{\psi}(z)|^2 - |\psi(z)|^2}.$$

In this paper only the first, less strict, inequality is used.

7. Class W_σ functions.

$$W_\sigma = E_\sigma \cap L^2(-\infty, \infty).$$

8. Class $W_{\sigma+}$ functions.

$$\psi(z) \in W_{\sigma+} \quad \text{if} \quad \psi(z) \in W_\sigma$$

and

$$\psi(z) \geq 0 \quad \text{if} \quad \text{Im}(z) = 0.$$

9. The $(nDM)_\sigma$ class of functions is defined as follows:

$$\lambda(z) \in (nDM)_\sigma$$

if it permits everywhere of $(n-1)$ derivations, and the n th derivative exists piecewise (the existence of the 0th derivative means the function is continuous and

$$|\lambda^{(k)}(z)| \leq \sigma^k |\hat{\lambda}(z)| \quad (k = 1, 2, \dots, n).$$

10. From the definition of the above classes of functions it is obvious that

$$B_{\sigma} \subset E_{\sigma} \quad \text{and} \quad W_{\sigma} \subset E_{\sigma}.$$

11. Wiener-Paley's theorem [4].

$$F[F_{\sigma}] \equiv W_{\sigma} \quad \text{and} \quad F^{-1}[W_{\sigma}] \equiv F_{\sigma},$$

i. e., between F_{σ} and W_{σ} a mutually unambiguous correspondence is brought about by the Fourier transformation.

12.

$$W_{\sigma} \subset B_{\sigma}.$$

i. e., then, a function is included in E_{σ} and can be integrated quadratically, it is at the same time bounded on the real axis. Accordingly, if $\psi(z) \in W_{\sigma}$, then $|\psi(z)| < k$ on the real axis.

Proof: since on the basis of Wiener-Paley's theorem

$$\varphi(t) = F^{-1}[\psi(z)] \in F_{\sigma},$$

therefore

$$\begin{aligned} |\psi(z)| &= \left| \int_{-\sigma}^{\sigma} \varphi(t) e^{jzt} dt \right| \leq \int_{-\sigma}^{\sigma} |\varphi(t)| dt < \int_{-\sigma}^{\sigma} \sqrt{1 + |\varphi(t)|^2} dt < \\ &< \int_{-\sigma}^{\sigma} [1 + |\varphi(t)|^2] dt = 2\sigma + \int_{-\sigma}^{\sigma} |\varphi(t)|^2 dt < k. \end{aligned}$$

In other words, Bernstein's theorem also holds for the W_{σ} class of functions.

13. If $\psi(z) \in W_{\sigma}$, then $\mu(z) = |\psi(z)|^2 \in W_{2\sigma}$ and permits of absolute integration.

Proof:

$$\text{I.} \quad \mu(z) \in E_{2\sigma}.$$

This clearly follows from the definition of $E_{2\sigma}$, because

$$\ln |\mu(z)| = \ln |\psi(z)|^2 = 2 \ln |\psi(z)|.$$

$$\text{II.} \quad \mu(z) \in L^2(-\infty, \infty).$$

Since

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mu^2(z) dz = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z)|^4 dz \leq k_1 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z)|^2 dz < k_1 k_2,$$

there

$$|\psi(z)|^2 \leq k_1 \quad \text{and} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z)|^2 dz < k_2.$$

III. $\mu(z)$ permits of absolute integration, because

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\mu(z)| dz = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z)|^2 dz < k_2.$$

14. The inversion of the preceding theorem is likewise valid. If $\mu(z) \in W_{2\sigma}$ and permits of absolute integration, then $\mu(z)$ may always be written as follows

$$\mu(z) = |\psi(z)|^2, \text{ where } \psi(z) \in W_{\sigma}.$$

Proof:

I. From the Fejér-Riesz theorem, generalised by Krein, it follows that $\psi(z) \in B_{\sigma}$.

II. Since $\mu(z)$ permits of absolute integration, $\psi(z)$ can be integrated quadratically, wherefore $\psi(z) \in W_{\sigma}$.

15. If $\psi(z) \in W_{\sigma}$, then $\psi'(z) \in W_{\sigma}$.

Proof: since on the basis of Wiener-Paley's theorem

$$\varphi(t) = F^{-1}[\psi(z)] \in F_{\sigma},$$

therefore

$$\psi(z) = \int_{-\sigma}^{\sigma} \varphi(t) e^{izt} dt.$$

Differentiated in respect of z

$$\psi'(z) = j \int_{-\sigma}^{\sigma} t \varphi(t) e^{izt} dt.$$

Now if

$$t \varphi(t) \in F_{\sigma},$$

then according to Wiener-Paley's theorem (cf. A/11)

$$\psi'(z) \in W_{\sigma}.$$

It remains to be shown that

$$t \varphi(t) \in F_{\sigma}.$$

It is now obvious that

$$t \varphi(t) \equiv 0, \quad \text{if} \quad |t| > \sigma.$$

It is still to be proved that

$$t \varphi(t) \in L^2(-\sigma, \sigma)$$

$$\int_{-\sigma}^{\sigma} |t \varphi(t)|^2 dt < \sigma^2 \int_{-\sigma}^{\sigma} |\varphi(t)|^2 dt < k.$$

Accordingly,

$$\psi'(z) \in W_\sigma.$$

The theorem, of course, holds good for any of the derivatives.

16. For any integer n it is

$$W_\sigma \subset (nDM)_\sigma.$$

Proof: If

$$\psi'(z) \in W_\sigma,$$

then, from the Bernstein inequality,

$$|\psi'(z)| \leq \sigma |\hat{\psi}(z)|,$$

$$|\psi''(z)| \leq \sigma |\hat{\psi}'(z)| \leq \sigma^2 |\hat{\psi}(z)|,$$

$$\dots \dots \dots$$

$$|\psi^{(n)}(z)| \leq \sigma^n |\hat{\psi}(z)|,$$

which means exactly that it belongs to the $(nDM)_\sigma$ class of functions. In view of the fact that W_σ has additional conditions to obey, the $(nDM)_\sigma$ class is wider one than the W_σ class of functions.

17. If

$$\psi_1(z) \in W_\sigma \quad \text{and} \quad \psi_2(z) \in F_\sigma,$$

then

$$\psi_3(z) = \psi_1(z) * \psi_2(z) \in W_\sigma$$

(cf. Fig. 6).

Since $\psi_1(z) \in F_\sigma$, therefore $F^{-1}[\psi_1(z)] = \varphi_1(t) \in F_\sigma$. The inverse Fourier transform of $\psi_2(z)$, $\varphi_2(t) = F^{-1}[\psi_2(z)]$, is bounded on the entire real axis (the demonstration is analogous to that in 12), wherefore $\varphi_3(t) = \varphi_1(t)\varphi_2(t)$ belongs to F_σ and, accordingly, its Fourier transform is

$$F[\varphi_1(t) \cdot \varphi_2(t)] = \frac{1}{2\pi} \psi_1(z) * \psi_2(z) = \frac{1}{2\pi} \psi_3(z) \in W_\sigma.$$

18. If $P(z)$ and $Q(z)$ are polynomials of the same degree and the zeros

$Q(z)$ are all zeros of $\frac{\sin \sigma z}{z}$, then

$$h(z) = \frac{\sin \sigma z}{z} \cdot \frac{P(z)}{Q(z)} \in W_\sigma.$$

Demonstration: From the condition it follows that $h(z)$ is an entire transcendental function. We prove that

$$h(z) \in E_\sigma,$$

substituting $h(z)$ into the equation of definition

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\text{Max}_{|z|=r} \ln |h(z)|}{r} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\text{Max}_{|z|=r} \left\{ \ln \left| \frac{\sin \sigma z}{z} \right| + \ln \left| \frac{P(z)}{Q(z)} \right| \right\}}{r}.$$

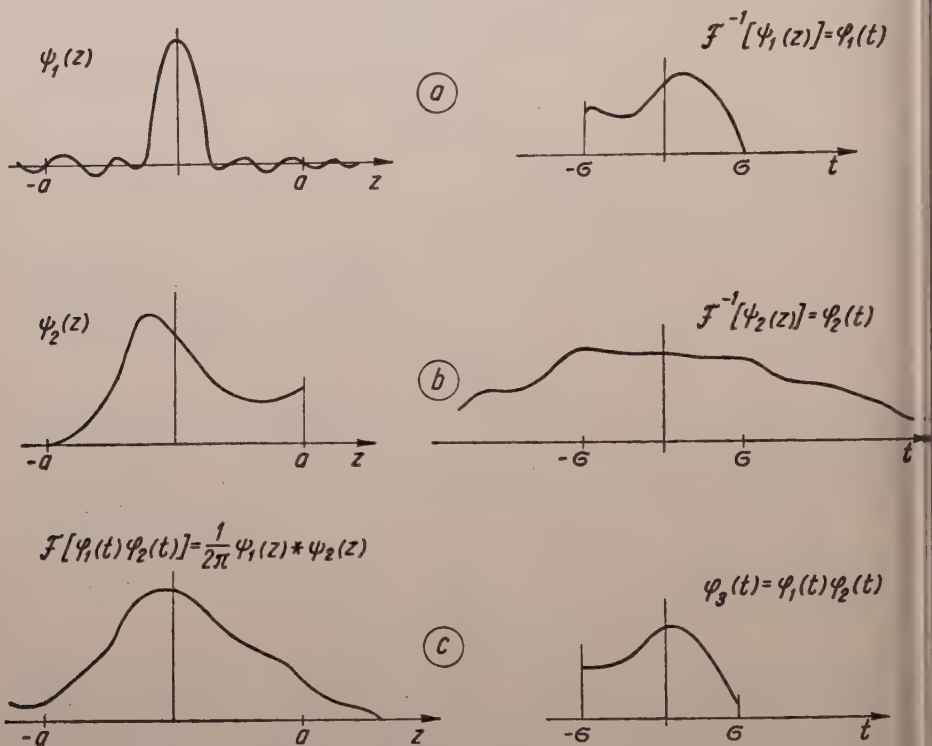


Fig. 6

Since

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \ln \left| \frac{P(z)}{Q(z)} \right|$$

tends to some constant value, the second member of the numerator can be allowed to fall away. Accordingly,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\text{Max}_{|z|=r} \ln |h(z)|}{r} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\text{Max}_{|z|=r} \ln \left| \frac{\sin \sigma z}{z} \right|}{r} = \sigma,$$

as

$$\frac{\sin \sigma z}{z} \in W_{\sigma}.$$

It remains to be shown that

$$h(z) \in L^2(-\infty, \infty).$$

Let us divide the real axis in accordance with Fig. 7. Let T be so large as to exclude zeros for $Q(z)$ in the $|z| \geq T$ domain. Then

$$\int_{-\infty}^{\infty} |h(z)|^2 dz = \int_{-\infty}^{-T} |h(z)|^2 dz + \int_{-T}^T |h(z)|^2 dz + \int_T^{\infty} |h(z)|^2 dz.$$

In the $|z| > T$ domain $|h(z)|^2$ can be majorated by the $\frac{A}{z^2}$ function.

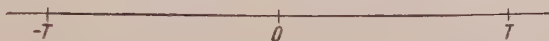


Fig. 7

Accordingly, the first and third integrals yield finite values. The second integral is likewise finite, the integrand being bounded and the integration extending over a finite interval.

19. In the $|z| < d$ interval

$$\frac{\sin nz}{nz}$$

can be uniformly approximated on the real axis with functions from W_1 .

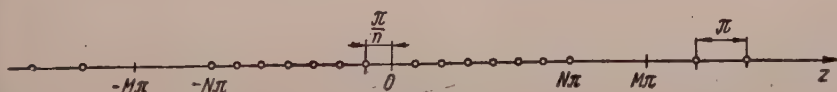


Fig. 8

This is demonstrated in two steps. First an $R_N(z, n)$ function is constructed which belongs to W_1 , then it is shown that with its aid it is possible uniformly approximate $\frac{\sin nz}{nz}$.

I. Let the zeros of the entire transcendental function $R_N(z, n)$ be (cf. Fig. 8)

$$z_k = k \frac{\pi}{n},$$

where $[k = 1, 2, \dots, Nn, n(M+1), n(M+2) \dots]$.

M is selected so as to ensure agreement in the number of zeros of the functions $R_N(z, n)$ and $\frac{\sin z}{z}$ in the $|z| \leq M\pi$ interval. This is fulfilled, if $nN = M$.

We now define $R_N(z, n)$ as the canonical product possessing the above roots :

$$R_N(z, n) = \prod_{k=1}^{Nn} \left(1 - \frac{n^2 z^2}{k^2 \pi^2} \right) \cdot \prod_{k=Nn+1}^{\infty} \left(1 - \frac{z^2}{k^2 \pi^2} \right).$$

This infinite product is convergent.

Taking into consideration that

$$\frac{\sin z}{z} = \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 - \frac{z^2}{k^2 \pi^2} \right)$$

the new form of $R_N(z, n)$ is

$$R_N(z, n) = \frac{\prod_{k=1}^{Nn} \left(1 - \frac{n^2 z^2}{k^2 \pi^2} \right)}{\prod_{k=1}^{Nn} \left(1 - \frac{z^2}{k^2 \pi^2} \right)} \cdot \frac{\sin z}{z} = \frac{P(z)}{Q(z)} \cdot \frac{\sin z}{z},$$

(where $P(z)$ and $Q(z)$ are polynomials of the same degree), and this, according to A/18, belongs to W_1 .

II. We now show that

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left| \frac{\frac{R_N(z, n)}{\sin nz}}{nz} \right| = 1, \text{ if } |z| \leq d.$$

Since the sign of the two functions in the $(-N\pi, N\pi)$ interval is the same for every z -value, this means that, provided N is sufficiently large, the difference between the functions can be made arbitrarily small on the real axis in the $|z| \leq d$ interval. Writing this down in detail

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left| \frac{R_N(z, n)}{\sin nz} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \left| \frac{\prod_{k=Nn+1}^{\infty} \left(1 - \frac{z^2}{k^2 \pi^2} \right)}{\prod_{k=Nn+1}^{\infty} \left(1 - \frac{z^2 n^2}{k^2 \pi^2} \right)} \right|.$$

Let us introduce the new variable

$$u = \frac{z}{Nn + 1}.$$

First, the numerator is estimated

$$\prod_{k=Nn+1}^{\infty} \left(1 - \frac{z^2}{k^2\pi^2} \right) = \prod_{k=Nn+1}^{\infty} \left(1 - \frac{u^2(Nn+1)^2}{k^2\pi^2} \right) = \Phi(u) ,$$

where $\Phi(u)$ is continuous and $\Phi(0) = 1$.

Therefore

$$\lim_{u \rightarrow 0} \Phi(u) = 1 .$$

So for any $\varepsilon > 0$ there exists a δ , for which $|\Phi(u) - 1| < \varepsilon$, provided $|u| < \delta$. It now remains to be shown that in the $|z| \leq d$ interval there exists for every z and any δ an N , for which $|u| < \delta$.

Since

$$|u| = \left| \frac{z}{Nn+1} \right| \leq \frac{d}{Nn+1} ,$$

$$N > \frac{d/\delta - 1}{n} ,$$

then

$$|u| < \delta \quad \text{and} \quad |\Phi(u) - 1| < \varepsilon .$$

The same can be shown for the denominator as well. Accordingly, the quotient too tends to 1. This completes the proof.

20. If

$$g(z) \in F_a ,$$

then

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin nz}{z} * g(z)$$

converges in the mean towards $g(z)$ on the real axis in the $|z| \leq a$ interval.

Giving this statement mathematical expression we can write :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\| \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\sin nz}{z} * g(z) - g(z) \right\|^2 = 0 . \quad (\alpha)$$

demonstration : In view of

$$F^{-1} \left[\frac{1}{\pi} \frac{\sin nz}{z} * g(z) \right] = L_n(t) \cdot \varphi(t) ,$$

where

$$L_n(t) = F^{-1} \left[2 \frac{\sin nz}{z} \right] = \begin{cases} 1, & \text{if } |t| \leq n, \\ 0, & \text{if } |t| > n \end{cases}$$

and

$$\varphi(t) = F^{-1} [g(z)],$$

on using the Parseval formula (α) can be written as follows:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |L_n(t) \varphi(t) - \varphi(t)|^2 dt &= \lim_{n \rightarrow \infty} 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(t)|^2 \cdot |L_n(t) - \\ &- 1|^2 dt = \lim_{n \rightarrow \infty} 2\pi \left[\int_{-\infty}^{-n} |\varphi(t)|^2 dt + \int_n^{\infty} |\varphi(t)|^2 dt \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

Since $\varphi(t) \in L^2(-\infty, \infty)$, the above expression tends to zero, and so the demonstration of the theorem is complete.

21. If $g(z) \in F_a$ and is bounded, then in the $|z| < a$ interval it can be approximated in the mean by functions of the W_1 class, i. e.,

$$\left\| \frac{n}{\pi} R_N(z, n) * g(z) - g(z) \right\| < \varepsilon, \quad \text{if } n > n_0,$$

where it follows from A/17 and A/19 that

$$\frac{n}{\pi} R_N(z, n) * g(z) \in W_1.$$

Proof:

$$\begin{aligned} &\left\| \frac{n}{\pi} R_N(z, n) * g(z) - g(z) \right\| = \\ &= \left\| \frac{n}{\pi} R_N(z, n) * g(z) - \frac{1}{\pi} \frac{\sin nz}{z} * g(z) + \frac{1}{\pi} \frac{\sin nz}{z} * g(z) - g(z) \right\| \leq \\ &\leq \frac{1}{\pi} \left\| n R_N(z, n) * g(z) - \frac{\sin nz}{z} * g(z) \right\| + \left\| \frac{1}{\pi} \frac{\sin nz}{z} * g(z) - g(z) \right\|. \end{aligned}$$

I. It follows from A/20 that, if $n > n_0$, then

$$\left\| \frac{1}{\pi} \frac{\sin nz}{z} * g(z) - g(z) \right\| < \frac{\varepsilon}{2}.$$

II. It is known from A/19 that for a fixed n , if $N > N_0$, then

$$\left| n R_N(z, n) - \frac{\sin nz}{z} \right| < \varepsilon'.$$

Let us estimate the first norm for $n > n_0$ and $N > N_0$.

$$\left\| \left(nR_N(z, n) - \frac{\sin nz}{z} \right) * g(z) \right\| = \left[\int_{-a}^a \left| \int_{-\infty}^{\infty} \left(nR_N(t, n) - \frac{\sin nt}{t} \right) \cdot g(z-t) dt \right|^2 dz \right]^{1/2}.$$

The absolute value can be estimated as follows. Since outside the $(-2a, 2a)$ interval $g(z-t)$ is zero and $|g(z)| < K$

$$\begin{aligned} & \left| \int_{-\infty}^{\infty} \left(nR_N(t, n) - \frac{\sin nz}{z} \right) \cdot g(z-t) dt \right|^2 \leq \\ & \leq \left(K \cdot \int_{-2a}^{2a} \left| nR_N(t, n) - \frac{\sin nz}{z} \right| dt \right)^2 \leq (K \varepsilon' 4a)^2. \end{aligned}$$

Inserting this into the expression for the absolute value, we get

$$\begin{aligned} \left\| \left(nR_N(z, n) - \frac{\sin nz}{z} \right) * g(z) \right\| & \leq \left[(K \varepsilon' 4a)^2 \cdot \int_{-a}^a dz \right]^{1/2} = \\ & = 4\sqrt{2} Ka^{3/2} \varepsilon', \end{aligned}$$

from which, if $\varepsilon' = \frac{\varepsilon}{8a^{3/2} K \sqrt{2}}$, it is seen that this norm is smaller than $\frac{\varepsilon}{2}$.

The theorem is thereby proved.

REFERENCES

- S. SILVER, *Microwave Antenna Theory and Design*, McGraw-Hill, New York, 1949.
- C. J. BOUWKAMP and N. G. DE BRUINS, *Philips Res. Rep.*, **1**, 135, 1948.
- P. AIGRAIN, *L'Onde Electrique*, **32**, 51, 1952.
- Н. И. Ахиезер: *Лекции по теории аппроксимации*, Гостехиздат, Москва, Ленинград, 1947.
- P. M. WOODWARD, *J. I. E. E.*, **93**, Part III, A, 1554, 1946.
- Б. А. Фуксии и Б. В. Шабат, *Функции комплексного переменного*, ГИТТЛ, Москва, Ленинград 1949.
- Н. J. RIBLET, *P. I. R. E.*, **36**, 620, 1948.
- P. M. WOODWARD and J. D. LAWSON, *J. I. E. E.*, **95**, Part III, 363, 1948.
- L. J. CHU, *J. Appl. Phys.*, **19**, 1163, 1948.

ОБСУЖДЕНИЕ ТЕОРИИ ПОВЕРХНОСТНОГО ИЗЛУЧАТЕЛЯ НА ОСНОВЕ СВОЙСТВ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ

Р. КОВАЧ и Л. ШОЙМАР

Резюме

На основе теории показательных функций, разработанной в математике, предполагая отделяющиеся функции освещенности, авторы обсуждают следующие проблемы антенны: необходимое и достаточное условия реализуемости характеристик направления, приближение характеристик любого направления, нижняя граница плотности при заданном выигрыше, далее различные задачи приближения.

THEORY OF SUPER-DIRECTIVE LINEAR ARRAYS

By

M. UZSOKY and L. SOLYMÁR

RESEARCH INSTITUTE OF TELECOMMUNICATION, BUDAPEST

(Presented by G. Bognár. — Received 1. X. 1955)

Using data pertaining to the elementary radiator feeding and geometrical arrangement, expediently selected characteristics of an aerial system are defined, viz.: geometrical gain, geometrical quality and tolerance sensitivity. The geometrical gain gives the gain of an array of isotropic radiators; the geometrical quality shows how many times less is the band width of the array than that of the elementary radiator; the tolerance sensitivity is the numerical expression of the extent to which the system is sensitive to current distribution variations. These characteristic properties are arrived at by making such simplifications in the strict physical definitions as result, on the one hand, in the separation of the properties relevant to the constructional details of the elementary radiator and to those of the aerial system; on the other hand, in formulas more amenable to mathematical treatment. These simplifications yield a simpler relationship of the three aforementioned quantities. Four of the current distributions dealt with in the literature are selected to show on hand of a few concrete examples, the values taken up by the newly introduced constants. Lastly, a generalisation of the solutions is attempted seeking the current distribution which gives the highest geometrical gain in case of various numbers of components and a prescribed geometrical quality. Mathematically, the original problem is reduced to an extremum problem with given auxiliary conditions.

I/1. Introduction

For a long time papers have been published dealing with the theory of the so-called "supergain" or super-directive antennae. Its essence is that with finite dimensions of the antenna any desired gain can be obtained. This end is achieved by means of continuous current distribution, or by the juxtaposition of a sufficient number of discrete radiators. The present paper deals only with the theory of the discrete radiators.

SCHELKUNOFF [2] was the first to take up this problem. He evolved a method for linear equidistant arrays whereby substantial gains are obtainable, he did, however, not deal with the upper limit of gain in case of a constant number of elements for variable current distributions. He mentions, all the same, that with a marked increase in gain both radiation efficiency and band width decrease.

DOLPH [3] took up the problem of maximum gain taking for his point of departure the requirements of radar technique and setting himself the task of determining the minimum main beam width at a given side-lobe attenuation. The angular resolving power of the locator depends indeed not on the gain but

on the width of the main beam. The problem was solved by DOLPH with the aid of TCHEBYCHEFF's polynomials.

The maximum gain for an end fire radiator consisting of n isotropic elements was first determined by UZKOV [4], who, however, took only two equidistant arrangements into consideration. He demonstrated that, with the distance between the elements being $\lambda/2$, $G = n$, and with the distance tending toward zero, $G = n^2$. His method of calculation was to separate the radiations of the elements into components orthogonal to each other in the n -dimensional complex space.

Using TCHEBYCHEFF's polynomials, an equidistant array of $\lambda/4$ total length and comprising 9 elements was designed by YARU [7]. Its maximum current is above 17 mA, with the other currents of roughly the same magnitude. In the main direction the sum of these currents gives a radiation, which in a single radiator corresponds to 39 mA effective current. Accordingly, all the currents must be kept constant with great precision and losses are bound to be substantial. From this YARU concluded that, as the super-directive array is exceedingly sensitive to tolerances and of small efficiency, it cannot be used for practical purposes.

That super-directive arrays are nonetheless of practical use has been proved by BLOCH, MEDHURST and POOL [9]. These workers have solved the extremum problem for a general case and determined the current distribution which yields the maximum gain for a given geometrical arrangement. They did not take into account band width and tolerance sensitivity when investigating current distribution, and so these two factors could only be determined during operation.

Let us now sum up, from the practical side, the requirements to be fulfilled by any linear array of radiators. Aerial arrays of this type are used predominantly for decimeter and meter wave bands, since for longer waves the applicability is limited because of their dimensions, while for microwaves radiators with continuous current distribution are generally preferred, being easily constructed.

Because radar is no longer operated in the above band, we need not discuss here the beam width of the main lobe, nor the attenuation in the side-lobes. In applying these aeriels for television or multi-channel purposes, the essential factors are

- (i) gain,
- (ii) band width,
- (iii) sensitivity to tolerances,
- (iv) radiation efficiency, or what is equivalent to it, effective gain.

Since it is shown below that in every case which is of practical account the gain almost agrees with the value of effective gain, this paper deals only with the first three factors.

1/2. Calculation of the magnetic field

The magnetic field due to a single radiator is given by

$$\bar{H} = \sqrt{\frac{R_s}{4\pi Z_0}} \frac{e^{-\gamma r}}{r} \mathcal{J} \bar{g}_e(\bar{r}^0), \quad (1)$$

where R_s denotes the radiation resistance of the aerial, Z_0 the wave impedance of free space, r the distance of the point of observation from the radiator and \bar{r}^0 a unit vector towards the point of observation, $\gamma = \alpha + j\beta$ is the complex propagation constant, α the attenuation, β the phase factor, \mathcal{J} the complex cur-

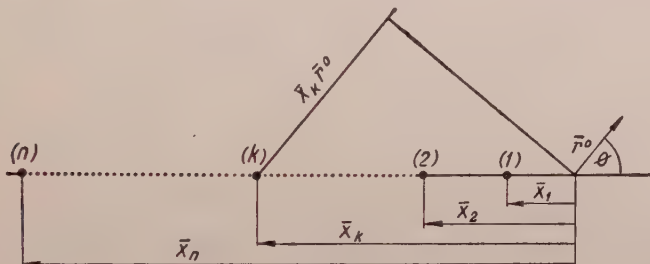


Fig. 1

rent in the radiator, and $\bar{g}_e(\bar{r}^0)$ is the radiation pattern of the elementary radiator, which satisfies the condition

$$\frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \bar{g}_e \bar{g}_e d\Omega = 1,$$

where Ω denotes the solid angle.

Departing from this formula, we now proceed to investigate linear aerial arrays, consisting of elements of identical pattern placed along a straight line. We suppose that the directivity of an elementary radiator is essentially less than that of the linear array. In Fig. 1 the points, altogether n in number, represent discrete radiators of patterns $\bar{g}_e(\bar{r}^0)$. Considering the path differences, the magnetic field caused by such a linear array in the Fraunhofer zone is given by

$$\bar{H} = \sqrt{\frac{R_s}{4\pi Z_0}} \frac{e^{-\gamma r}}{r} \bar{g}_e(\bar{r}^0) \sum_{k=1}^n \mathcal{J}_k e^{-\gamma (\bar{x}_k \bar{r}^0)}, \quad (2)$$

where \bar{x}_k is the vector directed from the origin of the coordinate system which we have chosen on the array axis towards the k -th element.

In our subsequent calculations the attenuation, α , will be neglected, and γ will be substituted by $j\beta$. In order to express equation (2) in a more conve-

nient form, we introduce the following abbreviations :

$$u = \beta (\bar{r}^0 \bar{\Delta}) = u_0 (\bar{r}^0 \bar{\Delta}^0) = u_0 \cos \Theta ; \quad u_0 = \beta \Delta ; \quad \bar{x}_k = \bar{\Delta} \xi_k ;$$

where the vector, $\bar{\Delta}$ is directed along the array axis, and its length $|\bar{\Delta}| =$ has an arbitrary and later appropriately chosen value. Let us further introduce the following spectra :¹

$$\underline{V}(u) = (e^{j\xi_1 u}, e^{j\xi_2 u}, \dots, e^{j\xi_k u}, \dots, e^{j\xi_n u}) ,$$

$$\underline{\mathcal{J}} = (\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \dots, \mathcal{J}_k, \dots, \mathcal{J}_n) .$$

With these notations (2) will assume the form²

$$\bar{H} = \sqrt{\frac{R_s}{4\pi Z_0}} \frac{e^{-j\beta r}}{r} \bar{g}_e(\bar{r}^0) \underline{\mathcal{J}} \underline{V}(u) .$$

I/3. Definition of the geometrical gain

For the calculation of the gain we first have to define some auxiliary quantities.

The power density referred to unit solid angle is given by

$$\frac{dP}{d\Omega} = r^2 (\bar{H}\bar{H}) Z_0 = \frac{R_s}{4\pi} (\bar{g}_e \bar{g}_e) \left[\underline{\mathcal{J}} \underline{V}(u) \right] \left[\underline{V}(u) \underline{\mathcal{J}} \right] .$$

The gain corresponding to the direction \bar{r}^0 is defined as the power density in the direction divided by the average power density :

$$G(\bar{r}^0) = \frac{dP}{d\Omega} : \frac{\widetilde{dP}}{d\Omega} = \frac{dP}{d\Omega} : \frac{1}{4\pi} \int \frac{dP}{d\Omega} d\Omega = \frac{R_s (\bar{g}_e \bar{g}_e) \left[\underline{\mathcal{J}} \underline{V}(u) \right] \left[\underline{V}(u) \underline{\mathcal{J}} \right]}{\int dP} .$$

The numerator can be interpreted as expressing the virtual power P_L which fed into an isotropic radiator gives rise to the same field in the specified direction, the denominator being the total radiated power P_s . The gain may then also be expressed in the form

$$G = \frac{P_L}{P_s} ,$$

where

$$P_L = R_s (\bar{g}_e \bar{g}_e) \left[\underline{\mathcal{J}} \underline{V}(u) \right] \left[\underline{V}(u) \underline{\mathcal{J}} \right]$$

¹ A bar above a letter denotes a vector of physical significance ; a bar below a letter denotes a spectrum of n dimensions.

² The scalar product of two vectors or two spectra, respectively, is defined as

$$\underline{a} \cdot \underline{b} = \sum_k a_k b_k^* ; \quad \bar{c} \cdot \bar{d} = \sum_k c_k d_k^* .$$

and

$$P_s = \frac{R_s}{4\pi} \int_{\Omega} [\mathcal{J} \underline{V}(u)] [\underline{V}(u) \mathcal{J}] (\bar{g}_e \bar{g}_e) d\Omega =$$

$$= \frac{R_s}{4\pi} \int_{\Omega} [\mathcal{J} \underline{V}(u)] [\underline{V}(u) \mathcal{J}] (\widetilde{\bar{g}_e \bar{g}_e})_{u=\text{const}} d\Omega.$$

where the swung bar denotes the average along the cone $u = \text{const}$.

Let us now assume that in relation to the pattern of the array the pattern of a single radiator changes slowly, and let us denote by u_M the place at which the pattern of the array is maximum. Then

$$P_s \cong \frac{R_s}{4\pi} (\widetilde{\bar{g}_e \bar{g}_e})_{u_M} \int_{\Omega} [\mathcal{J} \underline{V}(u)] [\underline{V}(u) \mathcal{J}] d\Omega =$$

$$= \frac{R_s}{4\pi} (\widetilde{\bar{g}_e \bar{g}_e})_{u_M} \int_0^\pi [\mathcal{J} \underline{V}(u)] [\underline{V}(u) \mathcal{J}] 2\pi \sin \Theta d\Theta = \quad (6)$$

$$= \frac{R_s}{2u_0} (\widetilde{\bar{g}_e \bar{g}_e})_{u_M} \int_{-u_0}^{u_0} [\mathcal{J} \underline{V}(u)] [\underline{V}(u) \mathcal{J}] du.$$

It is now possible to express the gain as

$$G(\bar{r}^0) = \frac{P_L}{P_s} = \frac{(\bar{g}_e \bar{g}_e)}{(\widetilde{\bar{g}_e \bar{g}_e})_{u_M}} \cdot \frac{[\mathcal{J} \underline{V}(u)] [\underline{V}(u) \mathcal{J}]}{\frac{1}{2u_0} \int_{-u_0}^{u_0} [\mathcal{J} \underline{V}(u)] [\underline{V}(u) \mathcal{J}] du}, \quad (7)$$

where the first factor, to be denoted subsequently by G_e , depends on the properties of the individual radiators, while the second is contingent on the feeding and the geometrical arrangement of the elements. (It will be noted that the expression for the radiated power is not, as would follow from general physical considerations, a quadratic function of the currents. We have approximated this quadratic form by multiplying the quadratic form of the output of an isotropic aerial with a correction factor dependent on the current distribution. The accuracy of our approximation increases with the sharpness of the pattern.) In the present paper we only discuss the second factor, which we call the geometrical gain and denote by G_g . (Incidentally, this geometrical gain is equal to the gain that would be obtained, were the array built of isotropic radiators.)

Introducing the matrices³

$$\underline{B} = \underline{V}(u) \mathbf{0} \underline{V}(u) \quad \text{and} \quad \underline{A} = \frac{1}{2u_0} \int_{-u_0}^{u_0} \underline{V}(u) \mathbf{0} \underline{V}(u) du$$

³ The elements of the matrix $\underline{c} = \underline{a} \circ \underline{b}$ are defined by $c_{ik} = a_i b_k^*$.

the geometrical gain will have the following form :

$$G_g = \frac{\mathcal{J} \underline{\underline{B}} \mathcal{J}}{\mathcal{J} \underline{\underline{A}} \mathcal{J}} .$$

To clarify the role of the first factor let us determine its value for the case which the individual radiators are elementary dipoles, with the same orientation and with their axes perpendicular to the array axis.

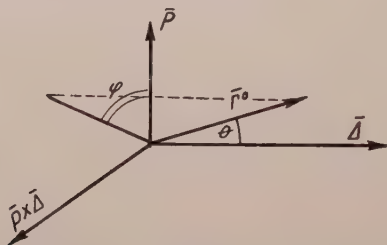


Fig. 2

In Fig. 2 the dipole moment is denoted by \bar{p} .

The pattern of the dipole is

$$g_e = |\bar{g}_e| = \sqrt{\frac{3}{2}} \sqrt{1 - (\bar{p}^0 \bar{r}^0)^2} ,$$

further

$$\frac{\bar{r}^0 \cdot \bar{\Delta}^0}{r \Delta} = \frac{u}{u_0} = \cos \Theta$$

and

$$\frac{\bar{r}^0 \times \bar{\Delta}^0}{r \Delta}$$

$$\bar{r}^0 = \bar{\Delta}^0 \cos \Theta + \sin \Theta (\bar{p}^0 \cos \varphi + \bar{p}^0 \times \bar{\Delta}^0 \sin \varphi)$$

(where the sign \times denotes the vector multiplication), whence it follows that

$$g_e = \sqrt{\frac{3}{2}} \sqrt{1 - \sin^2 \Theta \cos^2 \varphi} .$$

Averaging over the angles φ , we get

$$(\widetilde{g_e g_e})_{u_M} = \frac{3}{2} \left[1 - \frac{\sin^2 \Theta_M}{2} \right] .$$

Substituting this into the expression of G_e , it follows that

$$G_e = \frac{1 - \sin^2 \Theta \cos^2 \varphi}{1 - \frac{\sin^2 \Theta_M}{2}} = 2 \frac{\sin^2 \varphi + \left(\frac{u}{u_0}\right) \cos^2 \varphi}{1 + \left(\frac{u_M}{u_0}\right)^2},$$

which assumes its maximum if $\varphi = 90^\circ$, and then we have

$$G_e = \frac{2}{1 + \left(\frac{u_M}{u_0}\right)^2}.$$

$$\begin{aligned} \text{for an end fire array} \quad \Theta = 0 \quad ; \quad u_M = u_0, \quad G_e &= \begin{cases} 1. \\ 2. \end{cases} \\ \text{for a broadside array} \quad \Theta = 90^\circ; \quad u_M = 0, \quad G_e &= \begin{cases} 1. \\ 2. \end{cases} \end{aligned}$$

Obviously, then, the gain is affected by the pattern of the elementary radiator. But with the latter already selected, the gain depends solely on the feeding and the geometrical arrangement.

I/4. Definition of the effective geometrical gain

If the aerial losses are taken into account (and that indeed must be done, for if the radiators are too close to each other, the radiation resistance decreases markedly and the loss resistance can no longer be neglected) then the gain must be related to the input, and not to the output, as was done previously. The gain so defined is the effective gain.

$$\begin{aligned} G_{\text{eff}} &= \frac{P_L}{P_s + P_V} = \frac{R_s(\bar{g}_e \bar{g}_e) \mathcal{I} \underline{B} \mathcal{I}}{R_s(\bar{g}_e \bar{g}_e)_{u_M} \mathcal{I} \underline{A} \mathcal{I} + R_V \mathcal{I} \mathcal{I}} = \\ &= G_e \frac{G_g}{1 + \frac{R_V}{R_s(\bar{g}_e \bar{g}_e)_{u_M}} \frac{\mathcal{I} \cdot \mathcal{I}}{\mathcal{I} \underline{A} \mathcal{I}}}. \end{aligned}$$

Here the first factor is a familiar one, while the second will be called the effective geometrical gain. The expression

$$\frac{R_V}{R_s(\bar{g}_e \bar{g}_e)_{u_M}},$$

to be subsequently denoted by κ , depends on the properties of the elementary radiators. In the example treated in the preceding chapter the value of $(\bar{g}_e \bar{g}_e)_{u_M}$ is 3/4 for a broadside array and 3/2 for an end fire array.

This fact also indicates that the fraction R_V/R_S is of decisive importance for the value of κ . With these new notations:

$$G_{\text{geff}} = \frac{G_g}{1 + \kappa \frac{\mathcal{J} \mathcal{J}}{\mathcal{J} \underline{A} \mathcal{J}}} . \quad (7)$$

I/5. Definition of tolerance sensitivity

The toleration sensitivity, denoted by T , is defined as the ratio of the squared relative deviation of the magnetic field in the main direction to the squared relative deviation of the currents.¹ This expression, then, indicates the variation of the magnetic field intensity caused by a $\Delta \mathcal{J}_k$ variation in the currents.

In the evaluation of T the following suppositions are made:

1. The average of the errors of currents flowing in the elementary sources $\widetilde{\Delta \mathcal{J}} = 0$, i. e., $\widetilde{\mathcal{J}} = \mathcal{J}_N$, where the swung bar signifies the average of numerous measurements, and the index N the nominal value of the current.

2. The variations of currents flowing in different sources are independent of one another.

3. The relative squared deviation of the currents is the same for each elementary radiator,

$$\varrho^2 = \frac{\Delta \mathcal{J}_k}{\widetilde{\mathcal{J}_k}} \frac{\Delta \mathcal{J}_k^*}{\widetilde{\mathcal{J}_k^*}} ,$$

which simply means that each current can be adjusted to the nominal value with the same percentage of error.

It should be borne in mind that the second supposition is not strictly valid in a practical case, as at a fixed power the currents do depend on each other. From supposition 1 and 2 it follows that

$$\widetilde{\Delta \mathcal{J}_i \Delta \mathcal{J}_k^*} = \widetilde{\Delta \mathcal{J}_i} \widetilde{\Delta \mathcal{J}_k^*} = 0, \quad \text{if} \quad i \neq k .$$

We can now write

$$\overline{H}(u_M) = \overline{K} \underline{\mathcal{J}} V(u_M),$$

where \overline{K} denotes a constant vector, and

$$\Delta H(\overline{u_M}) = K \underline{\Delta \mathcal{J}} V(u_M),$$

where

$$\underline{\Delta \mathcal{J}} = (\Delta \mathcal{J}_1, \Delta \mathcal{J}_2, \dots, \Delta \mathcal{J}_k, \dots, \Delta \mathcal{J}_n) .$$

The squared average deviation of the magnetic field is given by

¹ The relative squared deviation is defined as the ratio of the average of the deviation squares to the square of the nominal value.

$$\begin{aligned} \underline{\underline{H}} \underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{H}} &= (\overline{K} \overline{K}) [\underline{V}(u_M) \underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}][\underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{V}(u_M)] = (\overline{K} \overline{K}) \underline{V}(u_M) (\underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{\underline{0}} \underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}) \underline{V}(u_M) = \\ &= (\overline{K} \overline{K}) \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n V_i(u_M) (\underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}_i \underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}_k^*) V_k^*(u_M) = \\ &= (\overline{K} \overline{K}) \sum_{i=1}^n V_i(u_M) \underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}_i \underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}_i^* V_i^*(u_M) = (\overline{K} \overline{K}) \sum_{i=1}^n \underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}_i \underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}_i^* = (\overline{K} \overline{K}) \varrho^2 \underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{\underline{\mathcal{J}}} \end{aligned}$$

which gives for T

$$T = \frac{\underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{H}} \underline{\underline{\Delta}} \underline{\underline{H}}}{\underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{\underline{\mathcal{B}}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}} = \frac{\underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}}{[\underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{V}(u_M)] [\underline{V}(u_M) \underline{\underline{\mathcal{J}}}]}$$

With our previously introduced notations

$$T = \frac{\underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}}{\underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{\underline{B}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}} \quad (11)$$

1/6. Definition of the geometrical quality

For the definition of Q the complex expression of power is the starting point.

$$P_s = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n Z_{ik} \mathcal{J}_i \mathcal{J}_k^*,$$

where the mutual impedances are denoted by Z_{ik} .

At the frequency of operation the power is real. With a change in the frequency, it becomes complex. (The band width is characterized by the extent to which, upon the effect of a certain percentual frequency change, the imaginary part of the power changes in relation to the original power.) Accordingly, the Q of the aerial as an oscillating element is defined as follows (see Appendix):

$$Q = \frac{1}{2} J_m \left\{ \frac{\omega}{P_s} \frac{dP_s}{d\omega} \right\}_{\omega_N} \quad (12)$$

denoting by Q_e the quality of the individual elements (which in fact is between 1 and 10), the mutual impedances are Q_e times less sensitive to a change in frequency than the self-impedances. This leads to the simplification of neglecting all the off-diagonal elements in the impedance matrix during the derivation in respect of frequency. With this simplification

$$Q = \frac{1}{2} \frac{\omega_N \left(\frac{d}{d\omega} \sum_{i=1}^n X_{ii} \underline{\underline{\mathcal{J}}}_i \underline{\underline{\mathcal{J}}}_i^* \right)_{\omega_N}}{R_s (\underline{\underline{g}}_e \underline{\underline{g}}_e)_{u_M} \underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}} = \frac{1}{(\underline{\underline{g}}_e \underline{\underline{g}}_e)_{u_M}} \frac{\omega_N}{2R_s} \frac{dX}{d\omega} \frac{\underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}}{\underline{\underline{\mathcal{J}}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{\mathcal{J}}}}, \quad (13)$$

where X is the imaginary part of the self-impedance, the same for each element the factor

$$(\widetilde{g_e g_e})_{u_M} ,$$

as we have already seen, is of the order of 1, and

$$\frac{\omega_N}{2R_s} \frac{dX}{d\omega}$$

gives the Q of the elementary radiator. The last factor expresses the influence which the geometrical arrangement exerts upon the band width, and which may be adequately termed the geometrical quality and denoted by Q_g .

$$Q_g = \frac{\mathcal{J} \mathcal{J}}{\mathcal{J} \underline{A} \mathcal{J}} . \quad (14)$$

1/7. Relationships between G_g , G_{geff} , T , and Q_g

Let us collect here our previously introduced quantities :

$$G_g = \frac{\mathcal{J} \underline{B} \mathcal{J}}{\mathcal{J} \underline{A} \mathcal{J}} , \quad G_{geff} = \frac{G_g}{1 + \kappa \frac{\mathcal{J} \mathcal{J}}{\mathcal{J} \underline{A} \mathcal{J}}} ,$$

$$Q_g = \frac{\mathcal{J} \mathcal{J}}{\mathcal{J} \underline{A} \mathcal{J}} , \quad T = \frac{\mathcal{J} \mathcal{J}}{\mathcal{J} \underline{B} \mathcal{J}} .$$

The following relationships are at once evident :

$$G_{geff} = \frac{G_g}{1 + \kappa Q_g} \quad \text{and} \quad G_g T = Q_g . \quad (15)$$

For aerials that have so far been put into operation κ is less¹ than 10^{-4} nor can Q_g assume any great value owing to requirements of band width. So in cases of practical account there is

$$G_{geff} \approx G_g .$$

This leads to the conclusion that in respect of practical use the band width is the chief limiting factor and not the loss. For this reason G_{geff} will be neglected in our further calculations.

¹ If only the ohmic losses are taken into consideration and a sinusoidal current distribution is assumed for a half-wave copper dipole, we have

$$\frac{R_V}{R_s} \approx 5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{cm}}{d} \sqrt{\frac{\lambda}{m}} ,$$

where d is the diameter of the dipole aerial.

I/8. Dependence of G_g , T and Q_g on the patterns

In calculating the values of Q_g , T , and G_g for some arrangement, we not infrequently find that the patterns are more amenable to mathematical treatment than the expression of currents, wherefore we now express our formulas with the aid of the former.

As in the following only isotropic point sources are taken into consideration, the pattern is given by

$$g(u) = \mathcal{J} \underline{V}(u) \quad (17)$$

In this case the current distribution is

$$\underline{\mathcal{J}} = \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{2b} \int_{-b}^b g(u) \underline{V}(u) du, \quad (18)$$

Equation (18) can be proved in the following manner. On substituting (17) into (18) we have

$$\underline{\mathcal{J}} = \left\{ \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{2b} \int_{-b}^b \underline{V}(u) \mathbf{O} \underline{V}(u) du \right\} \underline{\mathcal{J}} = \underline{\mathcal{J}}$$

By separation into components we can show that

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{2b} \int_{-b}^b \underline{V}(u) \mathbf{O} \underline{V}(u) du = \underline{I},$$

where \underline{I} is the unit matrix.

This means, that we have the following identity :

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{2b} \int_{-b}^b G_g(u) du = \frac{1}{\underline{\mathcal{J}} \underline{A} \underline{\mathcal{J}}} \underline{\mathcal{J}} \left\{ \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{2b} \int_{-b}^b \underline{V}(u) \mathbf{O} \underline{V}(u) du \right\} \underline{\mathcal{J}} = Q_g$$

from which it can be seen that only G_g needs to be expressed by the patterns, since an integration gives Q_g , and the quotient of the two gives T .

The gain expressed by the patterns is given by a well-known, physically almost self-evident formula :

$$G_g = \frac{(\bar{g} \bar{g})_{u_M}}{u_0} \cdot \frac{1}{2u_0} \int_{-u_0}^{u_0} (\bar{g} \bar{g}) du$$

Let us also note the value of Q_g and T in this representation

$$Q_g = \frac{\lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{2b} \int_{-b}^b (\bar{g} \bar{g}) du}{\frac{1}{2u_0} \int_{-u_0}^{u_0} (\bar{g} \bar{g}) du}, \quad T = \frac{\lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{2b} \int_{-b}^b (\bar{g} \bar{g}) du}{(\bar{g} \bar{g})_{u_M}}.$$

In case of an equidistant array, the function $g(u)$ is periodic with a period 2π and the above expressions may be further simplified.

Let the distance between neighbouring elements be Δ , and let us assume that the origin of the coordinate system is at the position of the first element. Then

$$\xi_k = k - 1, \quad V(u) = (1, e^{ju}, \dots, e^{j(k-1)u}, \dots, e^{j(n-1)ju}),$$

while the integral will assume the form

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{2b} \int_{-b}^b (\bar{g} \bar{g}) du = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{2k\pi} \int_{-k\pi}^{k\pi} (\bar{g} \bar{g}) du = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (\bar{g} \bar{g}) du.$$

For an equidistant array, therefore,

$$Q_g = \frac{\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (\bar{g} \bar{g}) du}{\frac{1}{2u_0} \int_{-u_0}^{u_0} (\bar{g} \bar{g}) du}, \quad T = \frac{\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (\bar{g} \bar{g}) du}{(\bar{g} \bar{g})_{u_M}},$$

From equation (19) it is at once obvious that for any u_0 which is an integral multiple of π , $Q_g = 1$, i. e., for an array, where the spacing is an integral multiple of $\lambda/2$, the band width is unchanged.

I/9. Examples

a) *Current distribution with equal amplitudes.* For generating a wave front in the direction of u_M it is plausible to use a feeding which results in equal current amplitudes, with the phases corresponding to the phase of the wave front. In this case

$$\mathcal{I} = \hat{\mathcal{I}} V(u_M),$$

where $\hat{\mathcal{I}}$ denotes the amplitude of current flowing at the input point of the elementary radiators.

The detailed calculations will not be reproduced here only the results will be shown by diagrams. Generally, G_g , T , and Q_g are all functions of u_0 and other parameters, wherefore we shall use in the following a representation which is

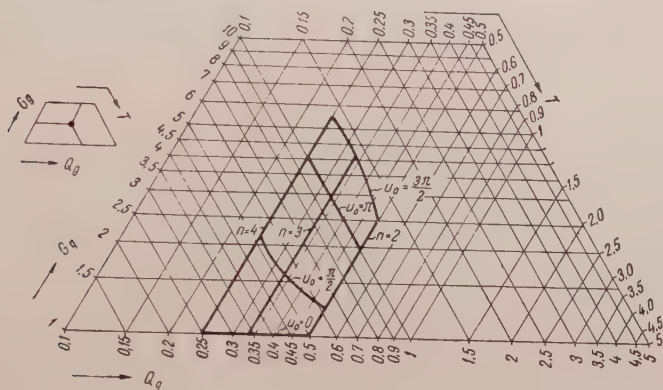


Fig. 3

somewhat different from that customary. Keeping in mind that there exists a connection between G_g , Q_g , and T , these three quantities may be represented by the points of a plane; the points belonging to the same value of parameters we connect by a curve. Fig. 3 gives the case of a broadside array for parameters n and u_0 .

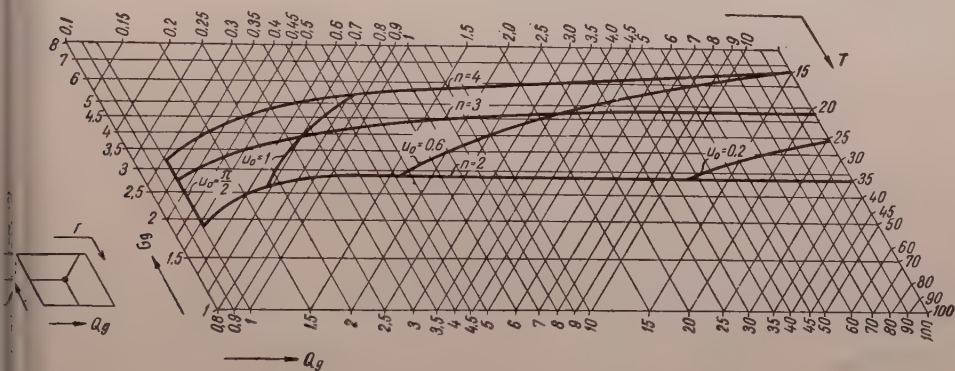


Fig. 4

b) Binomial distribution of current. Binomial current distribution is a simple example of "supergain" arrays. Let us investigate a system of end fire arrays where the single zero is in the direction $\Theta = 180^\circ$.

$$g(u) = e^{j(n-1)\frac{u-u_0}{2}} \left(\frac{\sin \frac{u+u_0}{2}}{\sin u_0} \right)^{n-1}.$$

Fig. 4 shows the situation for 2, 3, and 4 elements, respectively. It is seen immediately that a relatively small increase in the geometrical gain, G_g , is accompanied by an abrupt increase in both Q_g and T .

Let us now deal with the following problem of practical significance. We calculate the values of G_g , T , and Q_g for $\Delta = \lambda/4$ and, assuming a great number of elements, we investigate the dependence of the above three quantities on the

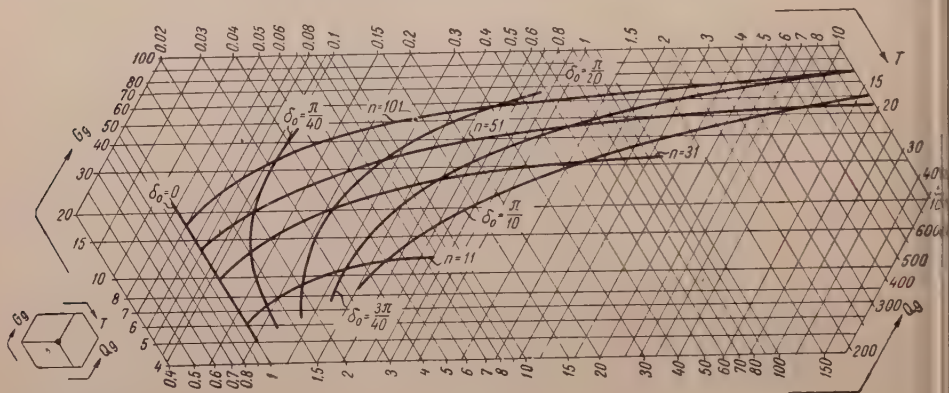


Fig. 5

overall length of the array. We introduce the denotation $\delta_0 = \frac{\pi}{2} - u_0$, where δ_0 indicates, in phase angle, the reduction of the spacing in relation to the case where $\Delta = \frac{\lambda}{4}$. Then

$$T \cong \frac{e^{(n-1)\delta_0^2}}{\sqrt{(n-1)\pi}}, \quad G_g = \frac{\sqrt{(n-1)\pi}}{e^{(n-1)\delta_0^2} \operatorname{erfc}(\delta_0\sqrt{n-1})},$$

$$Q_g \cong \frac{1}{\operatorname{erfc}(\delta_0\sqrt{n-1})},$$

where according to definition

$$\operatorname{erfc} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt.$$

Let us calculate, for a total array length of 2.5λ , 7.5λ , 12.5λ , and 25λ , the change in G_g , T , and Q_g in case the overall length is reduced by 0, 5, 10, 15, and 20%, respectively. The results are shown in Fig. 5. It can be seen that given a great number of elements even a small percentual deviation from the spacing of $\lambda/4$ gives rise to a rapid increase in both T and Q_g .

c) TCHEBYCHEFF—DOLPH current distribution. In case of $\Delta \geq \lambda/2$, the linear array designed according to the method of DOLPH gives the minimum beam width for a prescribed side-lobe attenuation. The method is described in [3].

Here we confine our attention to a particular case, that of an array consisting of 4 elements with spacing $\Delta = \lambda/2$, and a side-lobe attenuation of 20. From these data we get

$$G_g = 3,55, \quad T = 0,282, \quad Q_g = 1,$$

which means, that we have an array of easy construction, nevertheless with an overall length of $L = 3/2 \lambda$ and with an even smaller gain than that of an array fed by currents of equal amplitudes.

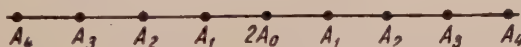


Fig. 6

The method of DOLPH was generalized by RIBLET [5] for the case $\Delta < \lambda/2$. He showed that with this current distribution "super-gain" features are likewise attainable. A concrete example is given by YARU [7] for a broadside array with 9 elements and of overall length $\lambda/4$, with side-lobe attenuation of 19,5 = R. Without following up his design in all its details, we only make use of his results. The array has a gain of $G_g = 8,5$ and the relative current amplitudes are

$$\begin{aligned} A_0 &= 8,893,659 \cdot 368 \ 7, \\ A_1 &= -14,255,059 \cdot 703 \ 2, \\ A_2 &= 7,161,483 \cdot 126 \ 6, \\ A_3 &= -2,062,922 \cdot 999 \ 4, \\ A_4 &= 260,840 \cdot 226 \ 8, \end{aligned}$$

where the A_i denote the currents flowing in the isotropic radiators as shown in Fig. 6.

In working out this example, YARU wished to show that "super-gain" materials are unsuitable for practical purposes. Let us now calculate the tolerance sensitivity and effective gain of this array by our definitions.

$$T = \frac{\mathcal{J} \mathcal{J}}{\mathcal{J} [\underline{V}(0) \mathbf{0} \underline{V}(0)] \mathcal{J}} = \frac{\sum_i^i \mathcal{J}_i^2}{\left(\sum_i^i \mathcal{J}_i \right)^2}$$

because all the elements of the matrix $\underline{B} = \underline{V}(0) \mathbf{0} \underline{V}(0)$ give 1.

Substituting the values given by YARU we get

$$T = 2,19 \cdot 10^{17}, \quad Q_g = 1,86 \cdot 10^{18}.$$

Due to the magnitude of Q_g , the effective geometrical gain is also strongly reduced in this example.

$$G_{\text{geff}} = \frac{G_g}{1 + \kappa Q_g} \cong \frac{1}{\kappa T}.$$

Assuming for κ a value of $5 \cdot 10^{-2}$, we get

$$G_{\text{geff}} = 9,15 \cdot 10^{-17}.$$

These calculations fully corroborate YARU's conclusion about the unsuitability of this arrangement.

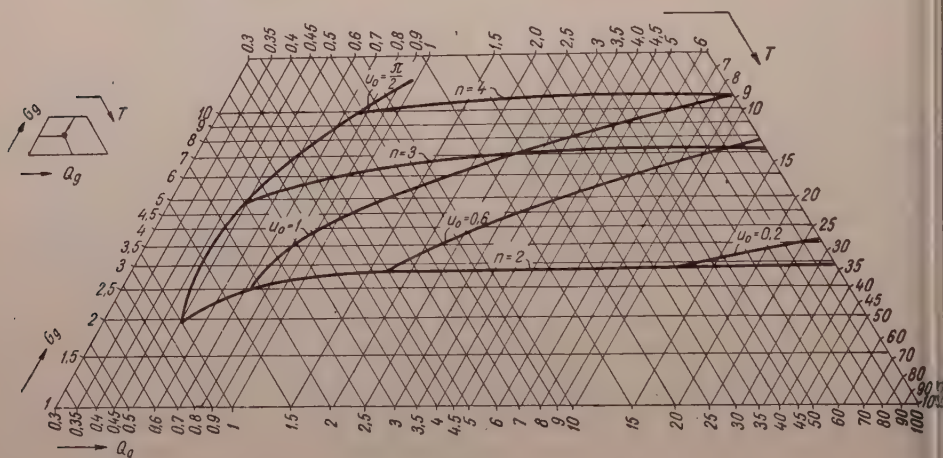


Fig. 7

d) *End fire array with equispaced zeros.* It was shown by SCHELKUNOV that the pattern of any equidistant linear array is given by a polynomial when the zeros of the pattern correspond to the zeros of the polynomial on the unit circle of the complex plane. Provided there is an even distribution of roots in the physical domain, antennae of "supergain" character are obtained.

Fig. 7 shows the variation of G_g , T , and Q_g for 2, 3, and 4 elements. The possible inferences are the same as those drawn in the case of the array with binomial current distribution, the only difference being that here the geometrical gain is greater.

II. Calculation of the optimum current distribution

Now we are in a position of to deal with our original object, namely, the solution of the extremum problem. As has been stated in the introduction, we seek the current distribution which gives rise to the maximum geometrical gain for a prescribed geometrical quality.

$$G_g = \max! \quad Q_g = \text{prescribed!}$$

Our expressions being homogeneous, it follows from equations (15) that our problem is tantamount to finding the maximum of $\underline{\mathcal{J}} \underline{B} \underline{\mathcal{J}}$ in respect of $\underline{\mathcal{J}}$, with prescribed $\underline{\mathcal{J}} \underline{\mathcal{J}}$ and $\underline{\mathcal{J}} \underline{A} \underline{\mathcal{J}}$.

$$\underline{\mathcal{J}} \underline{B} \underline{\mathcal{J}} = \max! \quad \underline{\mathcal{J}} \underline{\mathcal{J}} = \text{prescribed!} \quad \underline{\mathcal{J}} \underline{A} \underline{\mathcal{J}} = \text{prescribed!}$$

In view of the fact that the subspace of the $\underline{\mathcal{J}}$ space, the former fulfilling the subsidiary conditions, is bounded, $\underline{\mathcal{J}} \underline{B} \underline{\mathcal{J}}$ has a maximum. As, further, all the expressions can everywhere be differentiated, the maximum sought for is among the extrema given by the variation calculus. The finding of the extrema can thus be reduced to the

$$\underline{\mathcal{J}} \underline{B} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_1 \underline{\mathcal{J}} \underline{A} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_2 \underline{\mathcal{J}} \underline{\mathcal{J}} = \text{extr!}$$

extremum problem, where λ_1 and λ_2 are Lagrangian multipliers. We equate the variation of $\underline{\mathcal{J}}$ to zero, i. e.,

$$\delta [\underline{\mathcal{J}} \underline{B} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_1 \underline{\mathcal{J}} \underline{A} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_2 \underline{\mathcal{J}} \underline{\mathcal{J}}] = 0,$$

$$\underline{\mathcal{J}} \underline{B} \delta \underline{\mathcal{J}} + \lambda_1 \underline{\mathcal{J}} \underline{A} \delta \underline{\mathcal{J}} + \lambda_2 \underline{\mathcal{J}} \delta \underline{\mathcal{J}} + \delta \underline{\mathcal{J}} \underline{B} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_1 \delta \underline{\mathcal{J}} \underline{A} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_2 \delta \underline{\mathcal{J}} \underline{\mathcal{J}} = 0.$$

Putting $\delta \underline{\mathcal{J}}$ everywhere before the brackets

$$[\underline{\mathcal{J}} \underline{B} + \lambda_1 \underline{\mathcal{J}} \underline{A} + \lambda_2 \underline{\mathcal{J}}] \delta \underline{\mathcal{J}} + \delta \underline{\mathcal{J}} [\underline{B} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_1 \underline{A} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_2 \underline{\mathcal{J}}] = 0.$$

The two factors being conjugate complex

$$2 \operatorname{Re} \delta \underline{\mathcal{J}} [\underline{B} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_1 \underline{A} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_2 \underline{\mathcal{J}}] = 0.$$

This expression must vanish for any variation $\delta \underline{\mathcal{J}}$, which is only possible if

$$\underline{B} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_1 \underline{A} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_2 \underline{\mathcal{J}} = 0.$$

Using this value of \underline{B}

$$\underline{V}(u_M) [\underline{\mathcal{J}} \underline{V}(u_M)] + \lambda_1 \underline{A} \underline{\mathcal{J}} + \lambda_2 \underline{\mathcal{J}} = 0.$$

Including only minima by it, the supposition is legitimate that

$$\underline{\mathcal{J}} \underline{V}(u_M) \neq 0$$

and we now introduce these abbreviations :

$$\mu = -\frac{\lambda_1}{\mathcal{J} \underline{V}(u_M)}, \quad \lambda = -\frac{\lambda_2}{\mathcal{J} \underline{V}(u_M)}.$$

Then

$$\underline{V}(u_M) = \mu \underline{A} \mathcal{J} - \lambda \mathcal{J} = 0,$$

whence

$$\mathcal{J} = (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{V}(u_M). \quad (1)$$

As we have obtained only one solution, and as among the solutions there must be a maximum, our solution is the maximum sought for.

Substituted into (8), the value of \mathcal{J} in (19) gives the maximum G_g under the prescribed auxiliary condition.

$$\begin{aligned} G_g &= \frac{[\underline{V}(u_M) (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{V}(u_M)]^2}{(\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{V}(u_M) \underline{A} (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{V}(u_M)} = \\ &= \frac{[\underline{V}(u_M) (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{V}(u_M)]^2}{\underline{V}(u_M) (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{A} (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{V}(u_M)} = \\ &= \left\{ \frac{\partial}{\partial \mu} [\underline{V}(u_M) (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{V}(u_M)]^{-1} \right\}^{-1} \end{aligned}$$

which can be verified directly by derivation.

Similarly, substituting (19) into (11) we get

$$T = \frac{\underline{V}(u_M) (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-2} \underline{V}(u_M)}{[\underline{V}(u_M) (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{V}(u_M)]^2} = \frac{\partial}{\partial \lambda} [\underline{V}(u_M) (\lambda \underline{I} + \mu \underline{A})^{-1} \underline{V}(u_M)]^{-1}$$

Introducing the notations :

$$\underline{C} = \lambda \underline{I} + \mu \underline{A} \quad \text{and} \quad \Phi = \underline{V}(u_M) \underline{C}^{-1} \underline{V}(u_M)$$

we arrive at the following expressions :

$$G_g^{-1} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right)_\lambda, \quad T = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_\mu.$$

And since between the partial differential quotients there obtains the interrelation

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right)_\lambda \left(\frac{\partial \mu}{\partial \lambda} \right)_\Phi = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_\mu$$

we have for Q_g

$$Q_g = - \frac{\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \right)_\mu}{\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right)_\lambda} = - \left(\frac{\partial \mu}{\partial \lambda} \right)_\Phi.$$

The simplification inherent in our treatment leaves only Φ to be calculated, and from this quantity G_g , T , and Q_g can be derived in a straightforward manner. Reserving the general discussion for a forthcoming paper, here we deal only with two special cases, viz.: —

- a) for $\mu = 0$,
- b) for $\lambda = 0$.

a) $\mu = 0$, resp. $\lambda = 0$ indicates that the minimum tolerance sensitivity is sought for without any condition. Here

$$\lambda \underline{\mathcal{J}} = \underline{V}(u_M) ,$$

i.e., the minimum tolerance sensitivity is achieved when the current amplitudes are equal and the current phases agree with the phase of a wave travelling in the direction of u_M . But, this is nothing else than the current distribution with equal amplitudes dealt with under I/9a.

b) The condition $\lambda = 0$, resp. $\lambda_2 = 0$ signifies that the auxiliary condition concerning Q_g is not taken into account. In this case our results agree with those of BLOCH et al. [9]. Here we have

$$\mu \underline{A} \underline{\mathcal{J}} = \underline{V}(u_M) .$$

Equation (8) and the definition of \underline{A} show that the voltage spectra at the input points of the elementary radiators are given by

$$\underline{U} = R_s(\widetilde{g_e g_e}) \underline{A} \underline{\mathcal{J}} .$$

Therefore the results can also be formulated as follows: maximum gain is achieved when the voltage amplitudes are equal in the elementary radiators and their phases agree with the phase of a wave travelling in the direction of u_M . In this case

$$G_g(u_M) = \underline{V}(u_M) \underline{A}^{-1} \underline{V}(u_M) , \quad T = \frac{\underline{V}(u_M) \underline{A}^{-2} \underline{V}(u_M)}{[\underline{V}(u_M) \underline{A}^{-1} \underline{V}(u_M)]^2} ,$$

$$Q_g = \frac{\underline{V}(u_M) \underline{A}^{-2} \underline{V}(u_M)}{\underline{V}(u_M) \underline{A}^{-1} \underline{V}(u_M)} .$$

APPENDIX

The Q of the aerial, as an oscillating system, has been defined as follows

$$Q = \frac{1}{2} Jm \left\{ \frac{\omega}{P_s} \frac{dP_s}{d\omega} \right\}_{\omega_N}.$$

This definition agrees with the energetistic definition of Q whenever the impedance itself is a series or shunt connection of reactant and ohmic elements (Cf. for example, MIT 8 page 230). However, the energetistic definition is not invariably characteristic of the band width, as can be seen from a comparison of two circuits of Q 's identical according to energetics.

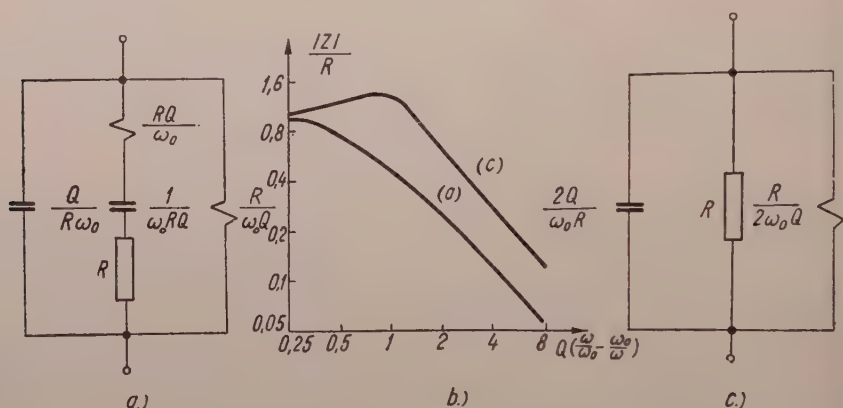


Fig. 8

Fig. a) is a good approximation of the input impedance of a turnstile aerial. Fig. c) is a common oscillating circuit. Fig. b) shows the frequency dependence of the impedance for both networks.

LITERATURE

1. C. W. OSEEN, Ann. d. Phys., (4) **69**, 202, 1922.
2. S. A. SCHELKUNOFF, Bell System Techn. Journ., **22**, 80, 1943.
3. C. L. DOLPH, Proc. of the I. R. E., **34**, 335, 1946.
4. A. I. UZKOV, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de l'U. R. S. S. **35**, 1946.
5. H. J. RIBLET, Proc. of the I. R. E., **35**, 489, 1947.
6. L. J. CHU, Journ. Appl. Phys., **19**, 1163, 1948.
7. N. YARU, Proc. of the I. R. E., **39**, 1081, 1951.
8. P. AIGRAIN, L'Onde Electrique, **32**, 51, 1952.
9. A. BLOCH, R. G. MEDHURST, S. D. POOL, Proc. of the I. E. E., **100**, 303, 1953.

ТЕОРИЯ СВЕРХНАПРАВЛЕННЫХ ЛИНЕЙНЫХ ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ РЯДОВ

М. УЖОКИ и Л. ШОЙМАР

Резюме

Из возбуждения элементарного излучателя и из данных геометрического распределения определяются удобно выбранные характеристики системы антенн: геометрический выигрыш, геометрическая добротность и чувствительность к точности. Геометрический выигрыш означает выигрыш ряда изотропных точечных источников, геометрическая добротность отвечает на вопрос, насколько меньше ширина полосы излучательного ряда, чем элементарного излучателя, и наконец чувствительность к точности количественно характеризует чувствительность к точности данного распределения тока. Мы пришли к этим определениям так, что строго физическим смыслом пренебрегаем, в результате чего, с одной стороны, разделяются структурные характеристики элементарного излучателя и излучательного ряда, а с другой стороны, получаются легче принимаемые в вычислениях формулы.

После таких пренебрежений получается простое соотношение трех величин. Из распределений тока, разбираемых в литературе, выбирается четыре, и на некоторых конкретных примерах показывается, какие значения введенные величины принимают. Потом, обобщая существующие до сих пор решения, надо искать то распределение тока, которое при различных числах элементов и при данной геометрической добротности дает максимальный геометрический выигрыш. Таким образом, определение распределения тока сводится к задаче исчислять условный экстремум.



VARIATIONAL PRINCIPLE AND POTENTIAL IN RELATIVISTIC DYNAMICS

By

G. SZAMOSI

INSTITUTE FOR PHYSICS OF THE ROLAND EÖTVÖS UNIVERSITY, BUDAPEST

(Presented by K. Novobátzky. — Received 26. XI. 1955)

This paper gives a very simple canonical formulation of the relativistic dynamics of the mass point, making use of the fact that the four equations of motion determine not only the three independent components of the four-velocity, but the rest mass too. For the determination of these four unknowns there are four equations, the Lagrange function of which can be put into covariant form. By the aid of the method described in the present paper the equations of motion can be derived from a Lagrange function of general type even for such cases, where up to now only ad hoc solutions have been found. The relativistic equivalent of the classical potential can be interpreted generally. The absolute value of the relativistic potential is bounded in case it does not depend on the velocity. The relativistic wave equations can be derived from the classical relations in a way analogous to the non-relativistic case. The rest mass and the proper time are non-commutative quantities.

The purpose of the present paper is to develop a Lorentz-invariant canonical method of relativistic dynamics similar in form to that of classical mechanics.

As is well known the canonical method is far from being so important in relativistic mechanics as in classical mechanics, which can be attributed to several reasons. To reformulate the canonical formalism relativistically it is necessary to abandon the distinguished role of energy and time of classical physics. By introducing new variables, this method becomes formally possible, but by no means elegant [1]. E. g. the Hamiltonian obtained by it is identically zero and the partial derivatives with respect to coordinates and moments are only formal.

The insufficiency of the usual canonical method is also shown by the fact that the formulation of the basic principles in relativistic quantum theory is quite different from that in non-relativistic quantum theory. E. g. the formulation of the Schrödinger-Gordon equation greatly differs from that of the Schrödinger equation. In the latter case it is apparent that a close connection exists between the canonical methods of classical mechanics and quantum mechanics, while in the former case even the idea of a connection does not arise.

The only exception is the case of a point charge moving in an electromagnetic field. In this case we may succeed in finding ad-hoc a Hamiltonian, the canonical equations of which give the Lorentz equations of motion. This, however, is a lucky accident rather than a general rule.

In fields where the rest mass is not constant the expressions of the Hamiltonian and related concepts are generally not known.

The difficulties involved in the relativistic generalization of the canonical method are the following. In classical mechanics the three independent components of velocity are determined by the three equations of motion. In relativistic dynamics the four components of velocity are not independent of each other owing to the relation

$$dx_\nu dx_\nu = -(c d\tau)^2.$$

Thus the four equations of motion do not give the four components of velocity and therefore the Lagrange function cannot be written down in classical form. The relativistic equations of motion can only then be derived from a Lagrange function which is similar to that of classical mechanics if the quantities which appear in variational form are suitably chosen. The most obvious solution results from the consideration that the four relativistic equations of motion determine not only the four-velocity, but the rest mass too and that we can thus build up the dynamical quantities from the four-velocity and the rest mass.

In connection with the relativistic generalization of the Lagrange function the problem arises as to which quantity can be regarded as the relativistic equivalent of the classical potential. One of the purposes of this paper is to solve this problem.

I

Thus, our purpose is to derive the relativistic equations of motion of a mass point from the variational principle

$$\delta \int L(x_\nu, \dot{x}_\nu, s) ds = 0,$$

with the usual variational conditions, i. e. the equations of motion should be the Euler-Lagrange equations of the variational principle (1):

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\nu} - \frac{\partial L}{\partial x_\nu} = 0, \quad (\nu = 1, 2, 3, 4) \\ (x_4 = ict)$$

where s is an invariant parameter.

Let us set up a Lagrange function of classical form

$$L = \frac{1}{2} m_0 \dot{x}_\nu \dot{x}_\nu - W.$$

Here m_0 is a constant of mass dimension, the exact definition of which will be given below; the \dot{x}_ν 's are the components of a four-vector of velocity dimension.

Let us assume first that $W = W(x_v)$, that is the potential does not depend on the "velocities" \dot{x}_v . Thus we get the equations of motion

$$m_0 \frac{d\dot{x}_v}{ds} = - \frac{\partial W}{\partial x_v} , \quad (v = 1, 2, 3, 4) . \quad (4)$$

From this we get

$$\frac{1}{2} m_0 \dot{x}_v \dot{x}_v + W = W_0 = \text{konst.} \quad (5)$$

In order to define the invariant parameter s of (1) which is to be of time dimension we put

$$\frac{ds}{d\tau} = \frac{m_0}{M} ,$$

where M is an invariant function of mass dimension, the meaning of which will be explained below. Substituting this definition of s into (5) we get :

$$- \frac{1}{2m_0} M^2 c^2 + W = W_0 .$$

The values of the constant W_0 can be determined with the aid of the following simple consideration. As is well known the Euler equations resulting from the variational principle $\delta \int (-m_0 c^2) d\tau = 0$ give the equations of motion of the free mass point

$$m_0 \frac{du_r}{d\tau} = 0 .$$

So that for the case $W = 0$ the variational principle (3) should be transformed into a variational principle describing the motion of a free particle and the following relation must exist : $m_0 = \{M\}_{W=0}$. Consequently

$$W_0 = - \frac{m_0 c^2}{2} ,$$

i.e. the function M is :

$$M = \frac{1}{c} \left[m^2 c^2 + 2m_0 W \right]^{1/2} . \quad (6)$$

We note that we may as well argue in the following manner. The integrand in the variational principle (1) has to be, of course, of action dimension, but s need not by itself be of time

dimension. If the definition of s is

$$\frac{ds}{d\tau} = \frac{1}{M}$$

(c. f. [2] where, however, the rest mass is treated as constant) the equations of motion are

$$\frac{d\dot{x}_\nu}{ds} = - \frac{\partial W}{\partial x_\nu},$$

with the condition $W = W(x_\nu)$.

Thus we have

$$-\frac{1}{2} M^2 c^2 + W = W_0,$$

whence

$$W_0 = \left\{ -\frac{1}{2} M^2 c^2 \right\} W = 0 \equiv -\frac{m_0^2 c^2}{2}.$$

Thus we get the rest mass m_0 without any special assumption and the mass defined by the equations of motion has a clear physical significance.

Now the equations of motion (4) can be re-written in a form clearly showing their physical significance:

$$\frac{M}{m_0} \frac{d}{d\tau} M u_\nu = - \frac{\partial W}{\partial x_\nu},$$

where $u_\nu = \frac{dx_\nu}{d\tau}$ (see above).

By the aid of (6), (7) can be written in the simple form:

$$\frac{d}{d\tau} M u_\nu = - \frac{\partial M c^2}{\partial x_\nu}.$$

As one can see M is the rest mass of the particle and $M c^2$ plays the role of classical potential energy (3) in the "relativistically conservative" case, i.e. when W does not depend on the generalized velocities.

The physical meaning of the function W is especially clear in a problem where $\frac{\partial W}{\partial x_4} = 0$. Then, according to the fourth equation of motion \mathcal{M}

$$= \frac{M}{\sqrt{1-\beta^2}} = \text{konst.}, \quad (\beta^2 = \frac{v_i^2}{c^2}, \text{ where } v_i \text{ is the three-velocity}).$$

Using this we obtain from (7) the equation of motion of perfectly classical form:

$$m_0 \frac{dv_i}{dt} = - \frac{\partial W'}{\partial x_i},$$

where t is the coordinate time and $W' = \left(\frac{m_0}{\mathcal{M}} \right)^2 W$. This was first proved for scalar meson field [4].

Let us now consider the case, when the potential may also depend on the velocities". Then (2) becomes

$$m_0 \frac{d\dot{x}_v}{ds} = \frac{d}{ds} \frac{\partial W}{\partial \dot{x}_v} - \frac{\partial W}{\partial x_v} . \quad (8)$$

Multiplying by \dot{x}_v , and assuming that W does not depend explicitly on s we get, after some calculation, the "energy integral" of (8):

$$\frac{1}{2} m_0 \dot{x}_v \dot{x}_v - \frac{\partial W}{\partial \dot{x}_v} \dot{x}_v + W = \text{konst.} ,$$

hence it is evident that the rest mass is constant only if

$$\frac{\partial W}{\partial \dot{x}_v} \dot{x}_v = W , \quad (9)$$

e. W is a homogeneous function of first order in \dot{x}_v .

This also suggests that the motion of constant rest mass is a special case of relativistic dynamics. We shall see, however, that condition (9) is satisfied by the potential of a point charge moving in an electromagnetic field.

II

Let us now consider some examples.

1. The equation of motion of a mass point moving in a scalar field (e. g. see [4]) is

$$\frac{d}{d\tau} \left(m_0 + \frac{\varphi}{c^2} \right) u_v = - \frac{\partial \varphi}{\partial x_v} .$$

From (5) follows

$$W = \varphi + \frac{\varphi^2}{2m_0 c^2} ,$$

which is just the "equivalent" potential of the scalar field, having now a quite general meaning as there has not been any restriction imposed on the field; thus our considerations are much more general than the non-relativistic [5] or the conservative field calculations [4].

2. It is of formal interest to investigate the gravitational equations of ORDSTRÖM [6]:

$$\frac{d}{d\tau} m_0 e^{\frac{\varphi}{c^2}} u_v = - m_0 e^{\frac{\varphi}{c^2}} \frac{\partial \varphi}{\partial x_v} .$$

where the potential is also quadratic.

As one can see from (6) :

$$W = -\frac{m_0 c^2}{2} \left(e^{\frac{2\varphi}{c^2}} - 1 \right).$$

In both of our examples the relativistic potential turns into the classical one, if $c \rightarrow \infty$.

3. The simplest form of the potential which depends also on the velocities is $W = B_\alpha(x_\mu) \dot{x}_\alpha$, where $B_\alpha(x_\mu)$ is an arbitrary four-vector. Owing to (9) the rest mass M is constant. If $B_\alpha = -\frac{e}{c} A_\alpha$ (where A_α is the four-potential of the electromagnetic field) we get the well-known Lorentz equations of motion :

$$m_0 \frac{du_\nu}{d\tau} = \frac{e}{c} u_\nu \left(\frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \right).$$

Finally we note that the theory of relativity automatically restricts the absolute value of W if it does not depend on the velocities. In an earlier paper G. MARX [7] showed that an equation of motion of the form

$$\frac{d(Mu_\nu)}{d\tau} = \frac{1}{M} \frac{\partial \varphi}{\partial x_\nu}$$

leads to an unlimited velocity of the particle in the classical conservative case $\left[\frac{\partial \varphi}{\partial x_4} = 0 \right]$ if φ is monotonous.

Now it can be seen from (7) that in the case of a potential depending on the four coordinates these equations of motion are the most general equations of motion of relativistic dynamics. This suggests that the relativistic potential must be bounded, i. e.

$$W \geq -\frac{1}{2} m_0 c^2 (= W_0)$$

must always be valid. If this condition were not satisfied the paradox mentioned above would exist. Thus the relativistic potential cannot be arbitrary as the attractive potentials in classical mechanics, e. g. singular, monotonously increasing, negative functions are excluded. This is the reason for the relativistic repulsion arising in attractive fields (cf. [4]).

III

In the preceding section we have shown how to derive equations of motion for all cases of practical importance in relativistic dynamics of the mass point from a Lagrange function of general type. Thus it is very simple to work out further details of the canonical method.

Turning now to Hamiltonian formalism we have simply :

$$H(p_v, x_v) = p_v \dot{x}_v - L, \quad \left(p_v = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_v} \right).$$

The meaning of the canonical equations obtained from this corresponds to (2); they do not involve any auxiliary condition. The expression for the Hamiltonian function is

$$H = \frac{p_v^2}{2m_0} + W,$$

$$W = W(x_\mu);$$

and

$$H = \frac{1}{2m_0} \left(p_v + \frac{\partial W}{\partial \dot{x}_v} \right)^2 + W - \frac{\partial W}{\partial \dot{x}_v} \dot{x}_v, \quad (10)$$

$$W = W(x_\mu, \dot{x}_\mu).$$

It is evident that, if (9) is satisfied, the Hamiltonian function very simply transforms, with the notation $P_v \rightarrow p_v + \frac{\partial W}{\partial \dot{x}_v}$, into the Hamiltonian of the free particle. This is always possible if the rest mass is constant. If e. g. $W = -\frac{e}{c} A_v \dot{x}_v$ (10) gives the well-known Hamiltonian of the point charge moving in an electromagnetic field.

It is also worth noting that H is identical with the first integral of the equations of motion.

The Jacobi equation is also obtained in a simple way. S being the integral of the action function we get

$$\frac{\partial S}{\partial s} + H\left(x_v, \frac{\partial S}{\partial x_v}\right) = 0. \quad (11)$$

The characteristic equations of this are just the canonical equations. As H does not depend explicitly on S we may write $S = S_0 - W_0 s$, where $W_0 = -\frac{m_0 c^2}{2}$.

I. e. the generally used relativistic Jacobi equation

$$\frac{1}{2m_0} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x_v} \right)^2 + W + \frac{m_0 c^2}{2} = 0 \quad (12)$$

is the form of (11) valid in the relativistically conservative case. Thus the Jacobi equation in a scalar field is :

$$\frac{1}{2m_0} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x_\nu} \right)^2 + \varphi + \frac{\varphi^2}{2m_0 c^2} + \frac{m_0 c^2}{2} = 0 .$$

(See e. g. [3].) In an electromagnetic field with the potential $W = -\frac{e}{c} A_\nu \dot{x}_\nu$

(11) has the well-known form :

$$\left(\frac{\partial S_0}{\partial x_\nu} - \frac{e}{c} A_\nu \right)^2 + \frac{m_0 c^2}{2} = 0 .$$

The canonical formalism outlined here allows for the quantizing of relativistic point mechanics in a way analogous to non-relativistic point mechanics. The commutation relations

$$[p_\nu, x_\mu] = \frac{\hbar}{i} \delta_{\mu\nu}$$

are known in their contents. As a new relation we get

$$[H, s] = i\hbar . \quad (12)$$

This relation takes a simple form if the rest mass is constant (e.g. in the case of a free particle or of a point charge moving in an electromagnetic field) :

$$[\tau, m_0] = \frac{2i\hbar}{c^2} .$$

This relation restricts the possibility of simultaneously measuring the proper time and the rest mass. This relation (without the factor 2) has already been assumed by several authors using heuristical considerations [8]; by our formalism it can be obtained without any additional condition.

The form of the most general dynamical equation resulting from (13) is

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial s} + H \right) \Phi = 0 ,$$

where Φ can always be separated in the form $\Phi = \psi(x_\nu) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m_0 c^2}{2} s \right]$, i. e. the Schrödinger-Gordon equation can be set up in the form of an "eigenvalue equation"

$$H \psi = -\frac{m_0 c^2}{2} \psi . \quad (13)$$

Taking H from the examples treated above (14) gives the Schrödinger-Gordon equation of the problems considered here.

For the sake of completeness we note that the Dirac equation can be derived uniformly in the framework of our formalism. If W is independent of \dot{x}_ν the Dirac equation takes the well-known form

$$(\gamma_\nu p_\nu - iMc) \psi = 0,$$

where M is determined by (6) (cf. [9]), whereas e. g. in an electromagnetic field the linearization of (14) leads to the well-known Dirac equation.

REFERENCES

- See. e. g. O. BERGMANN, Introduction to the Theory of Relativity, Prentice-Hall, New York 1953.
 A. SCHILD, Phys. Rev., **92**, 1009, 1953.
 K. NOVOTÁZKY, Ann. d. Phys., **11** (6), 285, 1953.
 G. SZAMOSI and G. MARX, Acta Phys. Hung., **4**, 219, 1954.
 J. WERLE, Bull. Ac. Pol., III **1**, 281, 1953.
 G. NORDSTRÖM, Phys. Zs., **13**, 1126, 1912.
 G. MARX, to be published.
 L. MOTZ, Phys. Rev., **93**, 901, 1954.
 G. SZAMOSI, Acta Phys. Hung., **5**, 463, 1956.

ПОТЕНЦИАЛ И ПРИНЦИП ВАРИАЦИИ В РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ДИНАМИКЕ

Г. САМОШИ

Резюме

В работе дано очень простое каноническое представление релятивистской динамики центра масс. Автор исходит из того, что четыре уравнения движения определяют,ряду с тремя независимыми компонентами четырехмерной скорости, и массу покоя. Для определения этих четырех неизвестных имеется четыре уравнения, функция Лагранжа, относящаяся к ним, получается ковариантной. С помощью рекомендуемого автором метода различные случаи, которые до сих пор рассматривались по отдельности, теперь разбираются совершенно универсально. Можно задать вполне общее релятивистское понятие, соответствующее классическому понятию потенциала. Абсолютное значение релятивистского потенциала, независящего от скорости, безусловно органичено. Релятивистские волновые уравнения квантовой механики можно выводить из классических соотношениях, точно как и в нерелятивистском случае.



AN INVESTIGATION OF MULTIPLE SPURIOUS DISCHARGES IN GM-COUNTERS

By

E. FRIEDLÄNDER* and D. KISS

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE OF PHYSICS, DEPARTMENT FOR COSMIC RAYS, BUDAPEST

(Presented by L. Jánossy. — Received 21. XII. 1955)

A simple and direct method has been worked out for distinguishing random and systematic "multiplets" in the counting of GM-pulses. This method has been applied to the study of the dependence of the average multiplicity of a GM-pulse on the overvoltage. It has been shown that the rise of the plateau of the counting characteristic is due in great part to the increase of the average multiplicity.

I. Introduction

The aim of the present investigation was to obtain experimental evidence of the role played by multiple spurious discharges** (which may follow the triggering of a GM-counter by an ionizing particle) in the slope of the plateau of the counting characteristic. The existence of such "multiplets" has been commonly known for quite a long time, the time distribution of multiplets and the dependence of this effect on overvoltage has been studied by several authors by the method of delayed coincidences (cf. e. g. [1]), but as far as we know, no systematic investigations on the dependence of the plateau of the counting characteristic on the average multiplicity of a count have been performed as yet. Since we suspected that the non-horizontality of the counting characteristic (i. e. the slope of the plateau) might be due in great part to the increase of the number of multiple discharges and their "multiplicity", we undertook to measure the average multiplicity of GM-counters of different types as a function of the applied overvoltage by a method more direct than that of delayed coincidences. This method yields at once the average multiplicity regardless of the time delay between the components of the multiplet, and has the rather general advantage of distinguishing directly random multiplets from systematic ones.

* On leave from the Institute of Physics, Academy of the Roumanian People's Republic, Cluj.

** For the sake of convenience we shall call such discharges in the following "multiplets".

II. Principle of the method and control measurements

The basic idea of the experiment was the following (see Fig. 1 for a block diagram of the electronic circuits):

The pulses from the GM-counter are fed to a shaping circuit S^* and from there, simultaneously, to two cathode followers CF_1 and CF_2 . The pulses from CF_1 are counted by means of a (scale-of-16) scaling circuit Sc , an end stage E_1 and a mechanical counter MC_1 , while the pulses from CF_2 are fed directly to the end stage E_2 , which is identical with E_1 . Owing to the poor resolving power of the mechanical counter MC_2 (~ 0.06 sec), doublet or in general multiplet pulses

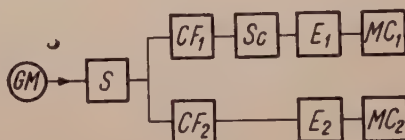


Fig. 1. Block diagram of the measuring arrangement

are counted by MC_2 as "singlets", while the scaler ($\tau \sim 7 \mu\text{sec}$) allows MC_1 to count every component of the multiplet as a separate pulse.

To test the efficiency of the discrimination between singlet and multiplet pulses, a control measurement was undertaken, using a pulse generator capable of delivering double pulses separated by a variable time interval.



Fig. 2. Block diagram of the double pulse generator used for controlling the electronic circuit

The generator was developed from the pulse inverter circuit described by REINER [3] (see also Fig. 2). The pulses from a standard pulse generator P are differentiated at DF , amplified at A_1 , and excite the self-oscillations of the resonant circuit LC . The resulting oscillations are rectified and integrated at DI , amplified at A_2 and fed through a buffer diode to the shaping circuit of the counting system instead of the GM-pulses. Varying the pulse width of P , we obtain a variable separation between the two output pulses. Let N be the counting rate of $Sc + MC_1$, and n the same for MC_2 . For a wide range of values of the separation (20 to 400 microseconds) the ratio n/N has been found to be exact

* A detailed description of the electronic circuits used was published by K. ZSDÁNSZKY [4].

equal to $1/2$. Since the measurements of KUPPERIAN et al. [1] have shown that the time lag between doublet pulses in GM-counters is $\lesssim 350$ microseconds, this means that all multiplets are counted by MC_2 as single pulses, and any difference between n and N can be ascribed to multiplets, provided the measurements are corrected for the dead time of the end stage mechanical counter. This correction can be made most easily as follows:

Let N_p be the number of particles triggering (in unit time) the discharge of the GM-counter. Since the dead time of the mechanical counter MC_2 is not constant, and since the dead time of the end stage E_2 is markedly (by a factor of at least 10) shorter than the average dead time τ_M of the mechanical counter, n is related to N_p (cf. [4]) by:

$$n = N_p \exp(-N_p \tau_M). \quad (1)$$

Eq. (1) is valid under the assumptions that the incoming particles trigger only "singlet" pulses, and are distributed in time according to Poisson's law.

Let now χ be the "average multiplicity" of a GM-pulse, i. e.

$$\chi \equiv 1 + \langle v \rangle = 1 + \sum_{v=0}^{\infty} v a_v, \quad (2)$$

where a_v is the probability that the pulse triggered by an incident particle is followed by v spurious discharges. The counting rate N of the scaler is then:

$$N = \chi N_p. \quad (3)$$

From (3) and (1) we obtain at once

$$y \equiv \frac{n}{N} = \frac{1}{\chi} \exp\left(-\frac{\tau_M}{\chi} N\right). \quad (4)$$

In a semilogarithmic plot of y versus N , eq. (4) yields a straight line, of slope $-(\tau_M/\chi)$ which intercepts the Y -axis at a point

$$h = -\ln \chi. \quad (5)$$

III. Experimental results

Detailed measurements by means of the method described above have been carried out on two GM-counters of different types: The first referred to hereafter as "R"-counter) was a radiological-type glass counter with aluminium cathode, ~ 25 mm in diameter and of effective length ~ 50 mm; the second (referred to as "C"-counter) was a cosmic-ray type copper cathode, 38 mm in diameter and of effective length 205 mm.* The experiments were performed in a mine at a depth of 20 m.** For very low counting rates the counters were shielded by 15 cm of lead. Large counting rates were obtained by means of a

γ -source of about 0,1 mC, and by using variable Al absorbers between source and counter tube.

Fig. 3 shows the counting characteristics of these two counters. The curves are normalized at 20 V overvoltage. (N_0 refers to the counting rate at $U = 20$ V.) Thus, as far as the slope of the plateau is concerned, "R" is "good", and "C" is a "bad" counter.

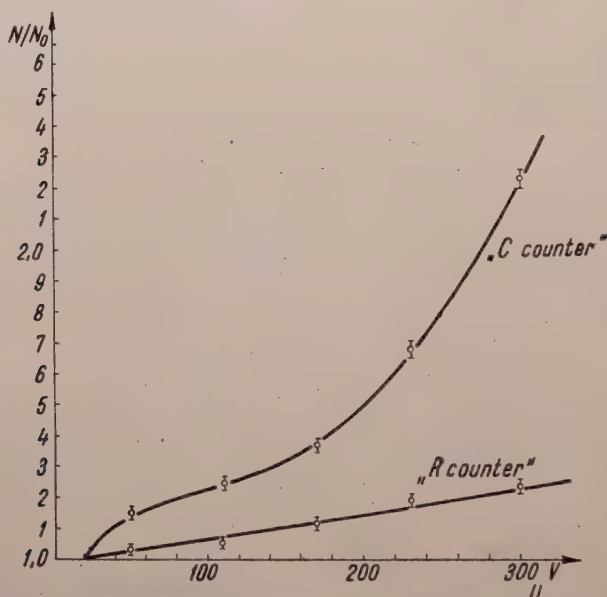


Fig. 3. Counting rate plotted against overvoltage: "R"-counter used for radiological measurements, "C"-counter used for cosmic ray measurements

Fig. 4 is the semilog plot of y versus N for the "R"-counter. As can be seen, the experimental points for all values of the overvoltage U lie satisfactorily on the same straight line of slope $\tau_M \sim 7 \cdot 10^{-4}$ min., and $h \approx 0$. In accordance with the "good" plateau of this counter, this shows that here the average multiplicity χ is practically equal to unity.

In Fig. 5 y is plotted as a function of N for the "C"-counter, for various overvoltages U . As can be seen, the points for $U = 20$ V lie satisfactorily along the same straight line as for the "R"-counter. For larger values of U the plots are also straight lines, but displaced with respect to the line $\chi = 1$ and with (slightly) different slopes. By the method of least squares we have computed the values of h and hence of χ corresponding to the different overvoltages U . A plot of χ versus U is given in Fig. 6 where, for the sake of comparison, we

* For a description of these counters see [5].

** This mine was chosen mainly because of the existing experimental facilities.

have reproduced the plot of N/N_0 versus U for the same counter from Fig. 3. The quantity

$$1 + \Delta \equiv \frac{N}{N_0} - (\chi - 1) \quad (6)$$

i.e., the sum of the singlet counting rate plus background for spurious counts from within the counter, is plotted in Fig. 6 versus N .

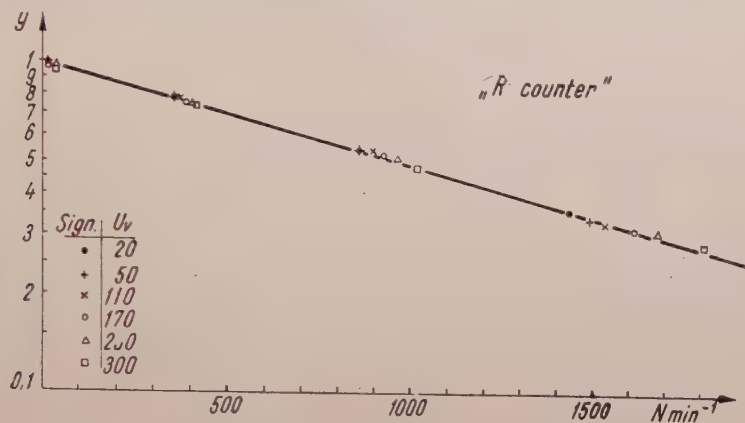


Fig. 4. The function $y(N)$ in the case of an "R"-counter

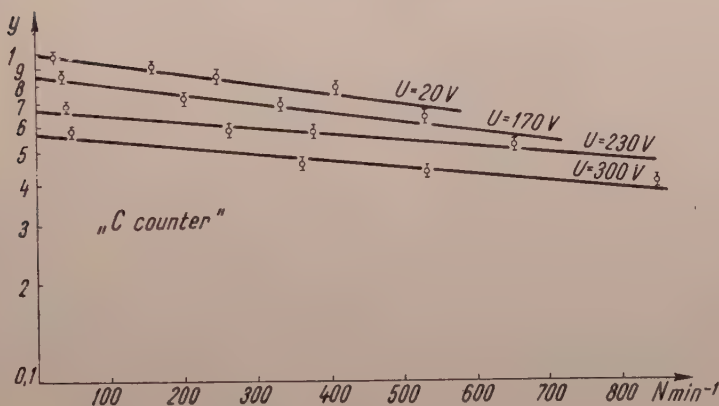


Fig. 5. The function $y(N)$ in the case of a "C"-counter

IV. Discussion of results

The results described in the preceding section show clearly that "good" counters give practically only singlet pulses, while in "bad" counters the initial pulse is frequently accompanied by one or more spurious discharges, the average multiplicity χ showing a marked increase with increasing overvoltage. It should

be borne in mind that this increase in χ can be understood not only as an increase of the number of spurious discharges, but also as an increase of the probability that a multiplet discharge of constant multiplicity should succeed in triggering the shaping circuit, owing to the overall increase in pulse height at higher overvoltages.* At any rate the similarity of the χ and N/N_0 plots, and the "good" shape of the Δ plot show convincingly that the major part of the plateau slope is actually due to the increase in χ , and that the elimination of multiplet discharges can yield a "good" plateau even for a "bad" counter.

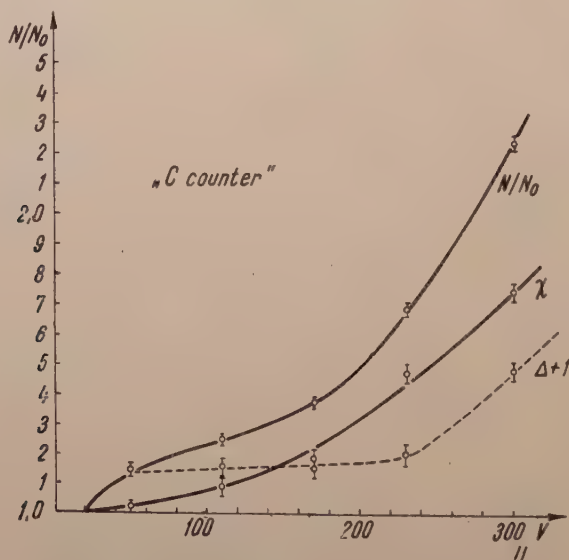


Fig. 6. N/N_0 , χ and $\Delta + 1$ for a "C"-counter

It is perhaps worth while noting that, to our knowledge, the method used by us for the determination of τ_M has not been applied before. At any rate the determination of τ_M from the slope of the $\ln y - N$ -plot is a much simpler and safer operation than the finding of the maximum on the curve. Moreover, the good fit of the points for the "R"-counter is a proof for the validity of eq. (4) for a wide range of counting rates.

V. Acknowledgements

The authors extend their thanks to J. SZIVEK and M. ONCESCU, who have helped in the measurements and numerical computations, and to M. E. HALMOS for performing the routine measurements. One of us (E. F.) expresses his gratitude to Prof. L. JÁNOSSY for the warm hospitality he experienced in his laboratory.

* The authors are indebted to L. NAGY for useful discussions on this subject.

REFERENCES

- A. G. FENTON and E. N. FULLER, *Proc. Phys. Soc. A*, **62**, 32, 1949.
J. KUPPERIAN, P. MURRAY and H. FEENY, *Rev. Sci. Instr.*, **22**, 60, 1951.
E. PICARD and A. ROGOZINSKI, *J. Phys. Rad.*, **14**, 445, 1953.
K. ZSDÁNSZKY, *KFKI Közl.*, (Bulletin of the Central Research Institute of Physics, in Hungarian) **3**, 22, 1955.
L. REIFFEL, *Rev. Sci. Instr.*, **22**, 704, 1951.
В. Векслер, Л. Грошев и Б. Исаев: Ионизационные методы исследования излучений, 88 §, Гостехиздат, 1949.
A. SOMOGYI, *KFKI Közl.* (Bulletin of the Central Research Institute of Physics, in Hungarian), **2**, 38, 1954.

ИССЛЕДОВАНИЕ МУЛЬТИПЛЕТНЫХ ВТОРИЧНЫХ РАЗРЯДОВ
В ГМ-СЧЕТЧИКАХ

Э. ФРИДЛЕНДЕР и Д. КИШШ

Резюме

Простой и непоередственный метод был разработан для разделения случайных систематических мультиплетных ДМ-импульсов. Этот же метод был применен для изучения зависимости средней мультиплетности от перенапряжения ГМ-счетчика. Оказалось, что падение пазато ГМ-счетчиков обусловлен, главным образом, возрастанием средней мультиплетности.



TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE DIFFERENTIAL SUSCEPTIBILITY OF COBALT IN STRONG MAGNETIC FIELDS

By

L. PÁL and T. TARNÓCZI

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS, BUDAPEST

(Presented by L. Jánossy. — Received 30, XII. 1955)

A curve showing a characteristic double maximum was obtained for the temperature dependence of the differential susceptibility of cobalt in strong magnetic fields; all sections of this curve could be interpreted on the basis of the theory of the rotation processes. The temperature of the minimum between the two maxima calculated from SUCKSMITH and THOMSON's [13] measurement on monocrystals is found to be in good agreement with the temperature pertaining to the experimentally determined minimum of the differential susceptibility of a polycrystalline sample. The effect of the $\alpha \rightleftharpoons \beta$ phase transformation on the differential susceptibility is studied.

Introduction

In a state near magnetic saturation, the shape of the magnetization curve of polycrystalline materials free of external and internal mechanical strains is determined almost exclusively by the magnetic anisotropy. From this it is obvious that in strong magnetic fields differential susceptibility and magnetic anisotropy are most closely interrelated. It is to be expected that much below the Curie temperature, the temperature dependence of the differential susceptibility is determined by the temperature dependence of the anisotropy constants, as the latter generally vary with temperature to a much greater extent than the saturation magnetization. It follows that the study of the temperature dependence of the differential susceptibility in strong magnetic fields is likely to yield valuable information on the temperature dependence of the magnetic anisotropy constants. Admittedly, the most reliable means by which to determine these constants and their temperature dependence is to make measurements on monocrystal specimens, yet in many cases it appears expedient to have these supplemented by similar measurements on polycrystalline specimens. For cubic ferromagnetic materials, a host of data [1] confirm good agreement between the anisotropy constants measured on monocrystals and those measured on polycrystalline materials.

While the field and temperature dependence of the differential susceptibility of cubic polycrystalline materials near magnetic saturation (iron, nickel, and their alloys), has been studied by a great number of authors, relatively little attention has been paid to cobalt of hexagonal structure. BLOCH [2], WEISS and FORRER [3], and ALLEN and CONSTANT [4] did investigate the tempera-

ture dependence of the saturation magnetization of cobalt but, as has been pointed out by MYERS and SUCKSMITH [5], the measurements of none of them can be regarded as reliable, because the magnetic properties of cobalt are very greatly dependent on the heat treatment applied near the transformation temperature. Basing themselves upon the findings of EDWARD and LIPSON [6] as well as TROIANO and TOKICH [7], MYERS and SUCKSMITH [5] found it more expedient to determine the exact value of the saturation magnetization on a monocrystal specimen. EDWARD and LIPSON [6] showed by X-ray structural determinations that even at room temperature occlusions of face-centred cubic structure are present in the hexagonal phase, and their concentration is contingent on the conditions of the heat treatment.

Earlier than by MYERS and SUCKSMITH [5], monocrystals of cobalt were measured by KAYA [8] and by HONDA and MASUMOTO [9]. On the basis of the temperature dependence of the magnetization curve as obtained by these authors BOZORTH [10] determined the temperature dependence of the first and second anisotropy constants of hexagonal cobalt. The mechanism of the α - γ allotropic transformation in cobalt was clarified in 1936 by the work of NISHIYAMA [11], who showed that the plane (111) of the face-centred cubic modification forms parallel to the (0001) base of the hexagonal modification, while the direction $(\bar{1}\bar{1}0)$ forms parallel to the direction (1120). In the course of the α - γ transformation the hexagonal crystal can only give rise to a single face-centred cubic crystal, while during the reverse process each face-centred crystal may yield four different hexagonal crystals, with well-defined orientations. However, the four hexagonal crystals arising from a single cubic crystal invariably re-transform into a single cubic crystal. These findings of NISHIYAMA [11] were later confirmed by KEHRER and LEIDHEISER [12]. Accordingly, from the hexagonal cobalt monocrystal a cubic crystal of known orientation cannot be produced, which will re-form after any number of phase transformations. SUCKSMITH and THOMPSON [13] made use of this fact and were the first to determine the temperature dependence of the anisotropy constants of cubic cobalt.

Their measurements showed the anisotropy constants of cubic cobalt to be smaller by an order of magnitude than those of hexagonal cobalt and, rather strikingly, the second anisotropy constant to be of greater absolute value than the first. On these grounds, it is to be expected that in a strong magnetic field the differential susceptibility of polycrystalline cobalt markedly decreases near the phase transformation, since one of the most important factors determining its magnitude, the magnetic anisotropy, likewise decreases considerably.

It has been known ever since the work of HONDA and MASUMOTO [9] that in the hexagonal phase the first anisotropy constant changes its sign at about 220° C, while the second, changing slowly, stays positive throughout. Therefore, at a temperature slightly above 220° C the differential susceptibility of the polycrystalline cobalt is expected to show a marked minimum.

The present study of these phenomena was undertaken with a view to enlarging our knowledge concerning the magnetic properties of cobalt.

Experimental

For the determination of the differential susceptibility the ballistic method proposed by CZERLINSKY [14] is well suited, but for small specimens, especially at high temperatures, it becomes increasingly cumbersome and insensitive. (For the determination of susceptibilities of 10^{-2} — 10^{-3} G/Oe, with an

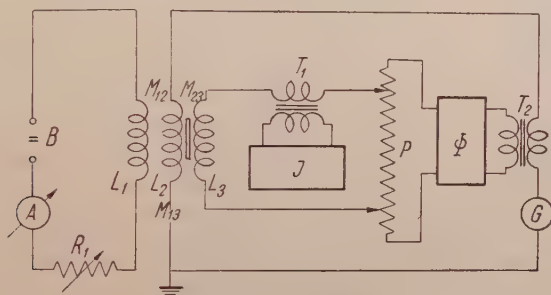


Fig. 1. Schematic drawing of apparatus. B, battery; L_1 and L_2 , solenoids; L_3 , measuring coil; T_1 and T_2 , transformers; Φ , phase shift bridge; P, potentiometer; I, zero indicator; G, audio generator; R_1 , regulating resistance; A, amperemeter; M_{12} , M_{13} , M_{23} denote the inductive coupling of coils L_3 , L_2 , L_3 .

accuracy to within 10%, the ballistic method cannot be applied in case of these specimens.)

BALSOVA [15] advocates the use of an alternating current induction bridge. However, her method contains a few errors of principle, as has been pointed out by one of us [16], wherefore it cannot be used for precise measurements.

In essence, the experimental arrangement used by us is based on the very accurate comparison of voltage amplitudes induced in the measuring coils, one of them free, the other containing the specimen. Fig. 1 presents the schematic drawing of our apparatus. The constant magnetic field (H) is produced by the solenoid L_1 , which is fed from battery (B), and the alternating magnetic field is produced by the solenoid L_2 and fed from the audio generator G (EMG type 3). The maximum amplitude of the alternating magnetic field is selected so as to be about 1% that of the constant field. The transformer T_2 supplies the comparison voltage to the potentiometer P of purely ohmic resistance across the phase shift bridge Φ [17], in order to compensate the voltage induced in the measuring coil L_3 . The zero of current in coil L_3 is indicated by the zero indicator I, coupled to it by transformer T_1 . The zero indicator is an amplifier of

great amplification ($k = 10^6$) and great selectivity (± 9 Hz) tuned to the frequency of generator G (332 Hz). The frequency for generator G is selected as to allow the error to be neglected which is caused by the skin effect of magnetically almost saturated specimen. With cylindrical specimens of 4 mm diameter used by us this error has been shown [16] to be negligible up to about 500 Hz.

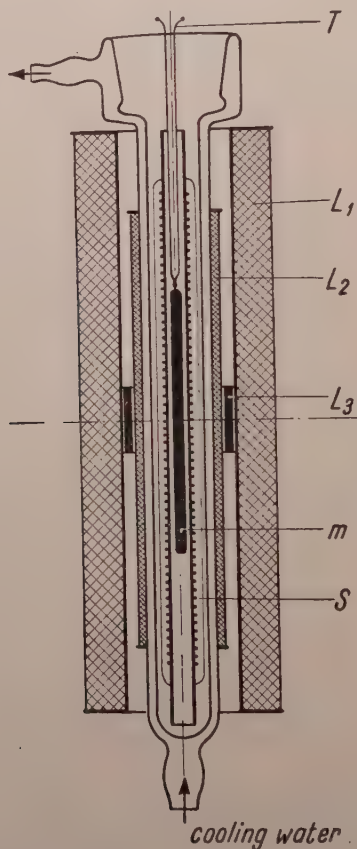


Fig. 2. Disposition of coils and specimen. L_1 and L_2 , solenoids; L_3 , measuring coil; S, heating coil; T, thermocouple; m, specimen

The measuring coil L_3 , 10 mm in height, 21 mm in diameter, and with $n_3 = 600$ windings was placed in the middle of the sample which was 80 mm in length and 4 mm in diameter. In this manner it was possible to correct the effect of the demagnetizing field with the aid of a ballistic demagnetization factor. Since the measuring coil did not fit the specimen completely, it was found necessary to check the effect of the air gap between the specimen and the coil.

control measurements showed the effect of the air-gap to be negligible for the geometry used. The sample itself was hung up by a fine tungsten filament in the center inside of a porcelain tube about 30 cm long and of a 5 mm inner diameter; inside this tube a bifilar heating coil of 0.1 mm platinum wire was secured for a stretch of about 20 cm. Sample and heater were then together placed in a double-walled glass vessel of special construction, about which was wound, for a length of 180 mm, the solenoid L_2 of $n_2 = 838$ windings, to produce the alternating magnetic field. Measuring coil L_3 was carefully isolated from solenoid L_2 , and positioned so that its center coincided with that of coils L_1 and L_2 . Fig. 2 represents the arrangement of solenoid L_2 , measuring coil L_3 , heater S , and sample m . The space between heater S and the inner wall of the double-walled glass vessel was filled with heatinsulating material, while coils L_2 and L_3 were cooled with water flowing through the glass vessel. The temperature of the sample was measured by means of a Pt/Pt-Rh thermocouple. When inserting the thermocouple, care was taken to ensure good contact of the hot junction with the sample. The heater S was connected to a voltage stabilizer (type Tr-500) of the tungsten diode type.

Solenoid L_2 produced a constant magnetic field, with inhomogeneities below 2%, on a stretch of about 80 mm. The cooling system of the solenoid made it possible to achieve a maximum field of 10 000 Oe. Details regarding the technical construction of this solenoid have been reported earlier by one of us [18].

Let us denote the cross section of the cylindrical sample with q , that of the measuring coil with Q , and let the number of windings of the measuring coil be $n_3 = n$. The voltage induced in the detecting coil L_3 is in the absence of the sample

$$E_0 = -nQ \frac{dh}{dt}, \quad (1)$$

in the presence of the sample

$$E_1 = -n \left\{ Q \frac{dh'}{dt} + 4\pi q \frac{dI}{dt} \right\}. \quad (2)$$

In equation (2), $I = I(H + h')$ represents the magnetization. It is $h' \leq h$, because even in an almost saturated state the sample is capable of increasing the total induction coefficient M_{12} (cf. Fig. 1), whereby the magnetic field of the current induced in L_1 , which diminishes the field of L_2 , is increased. The self-induction coefficient of coil L_2 is likewise increased and, at constant generator voltage, this leads to a decrease of the current passing through coil L_2 . G. SZILÁRDI [19] of the Mathematical Institute of the Hungarian Academy of Sciences calculated this effect, and found that under the conditions obtaining in

our case, $h \sim h'$. While

$$\frac{dI}{dt} = \frac{dI}{d(H+h)} \frac{dh}{dt} \sim \chi(H) \frac{dh}{dt},$$

combining equations (1) and (2), we have

$$\chi(H) = \frac{Q}{4\pi q} \frac{E_1 - E_0}{E_0}.$$

It can be seen from this equation that only the voltage ratios need to be determined with great accuracy, which is a much simpler task than to determine absolute values. All the same, strict conditions must be set in respect of the magnitude of the relative error $\frac{\Delta E}{E}$, where small values of χ are to be determined accurately. It is evident that the inequality

$$\frac{\Delta E}{E} \ll \frac{4\pi q \chi}{Q}$$

must be obeyed, which means that for our sample and coil dimensions and $\chi \sim 10^{-3}$, $\frac{\Delta E}{E}$ must be smaller than 10^{-3} . From this it clearly follows that the factors tending to reduce the determination accuracy of the voltage ratio must be carefully checked.

Apart from these sources of error, much attention needs to be paid to the error caused by the phase shift unit Φ . It is very difficult to design a phase shift unit which is capable of regulating the phase angle within wide limits, without amplitude dependence. If, in passing from the measurement of the voltage ratio to that of E_1 , a substantial phase change were needed, a serious error would be incurred in the determination of the ratio $\frac{E_1}{E_0}$. Luckily, in our case no great adjustment of the phase angle was necessary, for in a strongly polarizing field the specimen hardly influences the phase of the voltage induced in coil L_3 . Our measurements showed that the phase adjustments necessary in our measurements invariably caused errors in amplitude below 0.1%.

Similarly, great care was taken to reduce to a minimum the temperature dependence of the ohmic resistance of coil L_2 , since changes in resistance greatly impair the measurements. Accordingly, manganin wire of 0.3 mm diameter was used in winding coil L_2 . To be able to reduce voltage fluctuations to a minimum, coil L_2 and the transformer T_2 , which furnished the comparison voltage, were connected to an audio generator fed from a tungsten diode voltage stabilizer (type Tr-500). Ultimately, we were able to measure without difficulty and to within an accuracy of $\pm 10\%$ differential susceptibilities of the order 10^{-3} G/Oe.

The measurement itself was conducted as follows: First, the polarizing magnetic field H was adjusted by means of the control resistance R_1 , then the voltage E_0 , induced in the measuring coil L_3 without the specimen inserted in it, was compensated by adjusting the potentiometer P and phase shift unit Φ . Hereafter, specimen m was inserted into measuring coil L_3 , and when the heater had reached thermal equilibrium the voltage E_1 induced in coil L_3 was compensated again. Since it had been assumed that the phase shift unit Φ was suitable for amplitude-independent phase adjustment, it was possible to read the absolute values of voltages E_0 and E_1 on potentiometer P in some arbitrary units. On passing to another temperature, care was again taken not to record data until the thermal equilibrium had set in. Following the completion of a whole temperature cycle, the polarizing field H was adjusted to a new value, and after determining E_0 , the voltage induced without sample, the procedure was repeated as above.

Results and discussion

Specimens of electrolytically purified cobalt of 80 mm length and 4 mm in diameter were used. Chemical analysis showed the cobalt to be contaminated by 0,08% C and 0,27% Fe (Cu and Ni were not detected).

Previously to the actual measurement, the sample was heated in vacuum for 2 hours at 1000° C, then cooled slowly. This heat treatment was to free the sample from mechanical strains and, in addition, to reduce to the minimum the metastable cubic „occlusions” in the hexagonal phase.

The temperature dependence of the differential susceptibility of the sample prepared is shown in Fig. 3, where the curves a , b and c refer to different magnetic fields. In measuring the curves, we proceeded from lower to higher temperatures through the states of thermal equilibrium. It can be seen that the differential susceptibility shows a well-defined minimum at about 290 to 300° C, and that in the vicinity of 450° C it abruptly drops to a very low level. These drops around 450° C are particularly steep in strong fields. The temperature of the minimum can clearly be seen to depend but slightly on the polarizing magnetic field. The initial part of curve a plainly indicates that the susceptibility increases up to about 195° C. The temperature pertaining to the first maximum decreases with increasing field and, as can be seen in Fig. 3, the maximum itself becomes blurred.

This characteristic temperature dependence of the differential susceptibility of cobalt can easily be explained if we consider that, with field strengths as applied by us, it is the rotation processes that play the decisive part in the mechanism of magnetisation. Let us suppose that our sample was free from any inner or outer mechanical strain. Let us denote the first anisotropy constant of cobalt by $K_1(T)$, the saturation magnetisation by $J_s(T)$, at the temperature

T . With a magnetic field (H) sufficiently strong, at which however the condition $\frac{HJ_s}{K_1} < 1$ is still obeyed, the differential susceptibility pertaining to the rotational processes can be expressed, according to GANS [20], as

$$\chi \simeq \frac{J_s^3}{3K_1} \left\{ 1 - \frac{9}{16} \frac{J_s}{K_1} H + \frac{3}{10} \left(1 - 4 \frac{K_2}{K_1} \right) \frac{J_s^2}{K_1^2} H^2 - \dots \right\}, \quad (1)$$

where $K_2(T)$ is the second anisotropy constant. Since from absolute zero up to

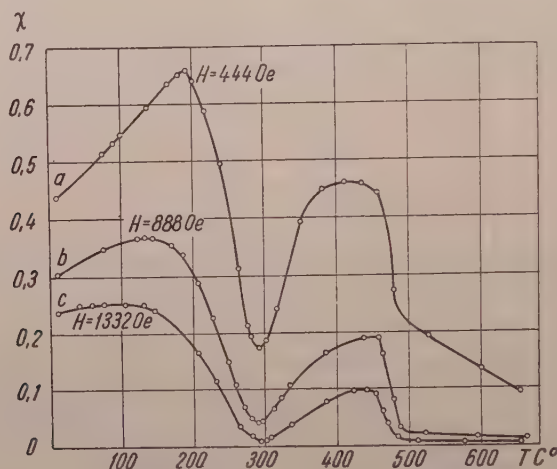


Fig. 3. Temperature dependence of the differential susceptibility of cobalt for various magnetic fields

150—200° C the ratio $\frac{J_s(T)}{K_1(T)}$ is of the order of 10^{-3} , it is possible, even on the condition that $\frac{HJ_s}{K_1} < 1$, to choose a value for H large enough to make the rotational processes the most important among the various processes of magnetization. $K_1(T)$ decreasing much more rapidly with increasing temperature than $J_s(T)$, the differential susceptibility is bound to increase with increasing temperature as long as the condition $\frac{HJ_s}{K_1} < 1$ is fulfilled. This initially ascending portion is particularly pronounced in curves a and b . With increasing field intensity, the ascending portion shifts to lower and lower temperatures, as can be clearly seen in Fig. 3.

In a magnetic field strong enough, or at a temperature adequately high, instead of condition $\frac{HJ_s}{K_1} < 1$, its opposite, namely, $\frac{HJ_s}{K_1} > 1$ obtains. The differ-

tial susceptibility, as has been shown by one of us [21], is in this case given by

$$\chi \simeq 2J_s^{-1} \left(\frac{4}{15} K_1^2 + \frac{64}{105} K_1 K_2 + \frac{128}{315} K_2^2 \right) H^{-3} + \quad (6)$$

$$3J_s^{-2} \left(\frac{16}{105} K_1^3 + \frac{128}{315} K_1^2 K_2 + \frac{512}{1155} K_1 K_2^2 + \frac{8192}{45045} K_2^3 \right) H^{-4} + 0 (H^{-5}) \quad .$$

Of course, this expression only holds for strainfree specimens, and on two conditions, namely, that the magnetic interaction of the crystal grains is negligible, and that the susceptibility of the real magnetization (the susceptibility of the para-process) is exceedingly small. The first is the more disputable condition, but one that does not affect the interpretation of our results. From expression (6) it at once follows that χ decreases when the absolute values of the anisotropy constants K_1 and K_2 decrease with temperature. Most probably, the sudden drop after the first maximum of the curves in Fig. 3 is related to this effect.

From earlier work on cobalt monocrystals it is known, that the constant K_1 changes sign at about 260° C, while K_2 , decreasing slowly with increasing temperature, remains positive throughout. Let us now suppose that in the temperature range from 250 to 350° C, already the first term of equation (6) gives a good approximation, if the magnetic field is strong enough. It is easily shown that the function

$$f(x) = a_2 x^2 + a_1 x + a_0, \quad (7)$$

$$\text{where } x = \frac{K_1}{K_2} \quad \text{and} \quad a_2 = \frac{4}{15}, \quad a_1 = \frac{64}{105} \quad \text{and} \quad a_0 = \frac{128}{315}$$

is nowhere zero for real x , its minimum being at $x = -\frac{a_1}{2a_2}$. If we make use of the fact that in this temperature range K_2 changes only very slightly, then the temperature fulfilling the condition

$$K_1(T_K) = -1.14 K_2(T_K) \quad (8)$$

will be the temperature of the minimum of the differential susceptibility. From the data of SUCKSMITH and THOMSON [13] we determined the temperature at which the K_1 and K_2 values belong that fulfil condition (8), and found that $T_K = 293, 0^\circ \text{C}$. The minimum differential susceptibility was observed by us at 294° C. The agreement can safely be said to be excellent. Using the data of

* While $K_1(T)$ changes by 45.6% in the interval 0—100° C, the variation of $J_s(T)$ in the same interval is only 1.1%.

SUCKSMITH and THOMSON [13], we further calculated, on the basis of equation (16), the temperature dependence of the differential susceptibility for a field of 1332 Oe near T_K , and compared the result with our experimentally determined curve. Fig. 4 shows that the minima of the experimental and the calculated curve coincide, and that they agree remarkably, particularly at higher temperatures. The reason for the greater discrepancy below T_K is that K_2 is rather large, so that expression (6) for our fields is no more than a rough approximation.

Because at about 390° C the absolute value of K_1 changes slowly, the differential susceptibility curve descends less steeply. At about 440° C, the differential

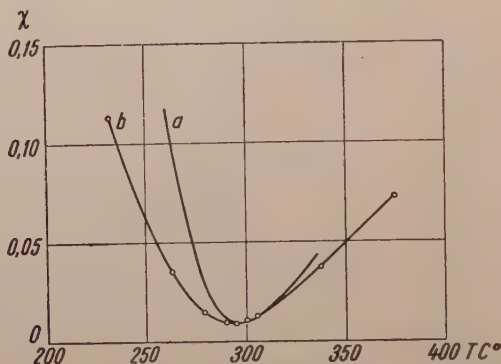


Fig. 4. Temperature dependence of the differential susceptibility near 300° C
a) theoretical curve calculated from equation (6). Values of K_1 and K_2 taken from SUCKSMITH and THOMSON's [13] data, b) curve determined by experiment

ential susceptibility shows a local maximum, and thereafter a rapid decrease. This rapid decrease is, however, due to the transformation of cobalt of hexagonal into cobalt of cubic modification.

The substantial change in the differential susceptibility caused by phase change can be used to good advantage in investigations of the phase change itself. Fig. 5 shows the differential susceptibilities for various fields measured during increasing and decreasing temperatures. It includes the data of SCHULZ [22], who studied in the region of phase transformation the temperature dependence of the electrical resistivity of cobalt samples differing in purity. The specimen he denoted Co I corresponds in purity to our sample. Fig. 5 gives a convincing illustration that the differential susceptibility is a much more sensitive characteristic of the phase transformation of cobalt than is the electrical resistivity. Our measurements showed the $\alpha \rightarrow \beta$ transformation to begin at 445° C and to terminate at 490° C, while the $\beta \rightarrow \alpha$ transformation was found to start at 400° C and to be completed at 340° C. As far as we are aware, these results rank among the most accurate ones hitherto obtained.

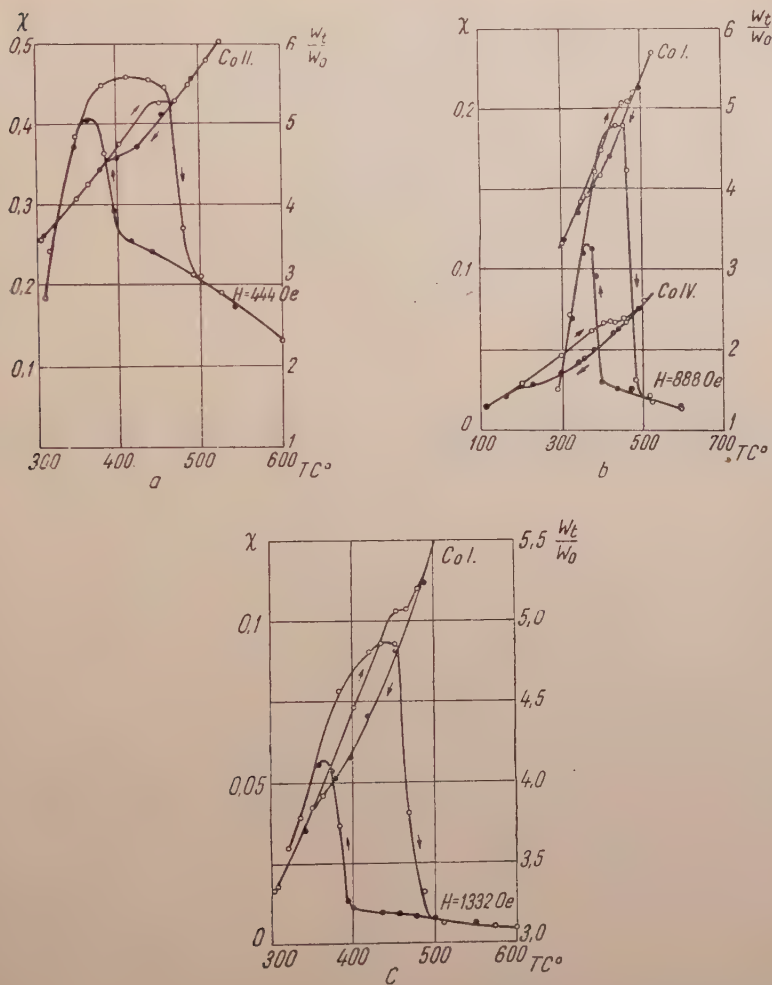


Fig. 5. Effect of $\alpha \rightleftharpoons \beta$ transformation of cobalt on differential susceptibility and electrical resistance. Open circles denote the values of both quantities measured during heating, dots those during cooling, in both cases in equilibrium. Curves Co I, Co II, and Co IV, represent SCHULTZE's (22) values for resistance change

REFERENCES

1. H. POLLEY, Ann. d. Phys., **36**, 625, 1938.
2. И. М. Пузей, Ж. Техн. Физ., **19**, 653, 1949.
3. Н. З. Мирясов, Вестник МГУ № 5, 65, 1951.
4. O. BLOCH, Vjschr. Naturf. Ges., Zürich, **56**, 415, 1911.
5. P. WEISS and R. FORRER, Ann. de Phys., **5**, 153, 1926; **12**, 279, 1929.
6. R. I. ALLEN and F. W. CONSTANT, Phys. Rev., **44**, 228, 1933.
7. H. P. MYERS and W. SUCKSMITH, Proc. Roy. Soc. A **207**, 427, 1951.
8. O. S. EDWARDS and H. LIPSON, J. Inst. Met., **69**, 177, 1943.
9. O. S. EDWARDS and H. LIPSON, J. Inst. Met., **69**, 167, 1943; Proc. Roy. Soc., **180**, 268, 1942.
10. A. R. TROIANO and J. L. TOKICH, Tech. Publ. Amer. Inst. Min. Engrs., No. 2348, 1948.
11. S. КАГА, Sci. Rep. Tôhoku Univ., **17**, 1157, 1928.

9. K. HONDA and M. MASUMOTO, *Sci. Rep. Tôhoku Univ.*, **20**, 323, 1931.
10. R. M. BOZORTH, *J. appl. Phys.*, **8**, 575, 1937.
11. Z. NISHIYAMA, *Sci. Rep. Tôhoku Univ.*, **25**, 79, 1936.
12. V. J. KEHRER and H. LEIDHEISER, *J. Chem. Phys.*, **21**, 570, 1953.
13. W. SUCKSMITH and J. E. THOMPSON, *Proc. Roy. Soc.*, **225**, 362, 1954.
14. E. CZERLINSKY, *Ann. d. Phys.*, **13**, 80, 1932.
15. Н. С. АКУЛОВ и К. М. БОЛБШОВА, *Вестник МГУ* № 9, 79, 1950.
16. Л. Пал: Диссертация, Москва, 1953.
17. D. PALLAGI, *KFKI Közl.* (in the press; in Hungarian.)
18. L. PÁL, G. ZSIGMOND, *KFKI Közl.*, **3**, 300, 1955 (in Hungarian).
19. G. SZILVAYNÉ, *KFKI Közl.*, **4**, 102, 1956 (in Hungarian).
20. R. GANS, *Ann. d. Phys.*, **15**, 28, 1932.
21. L. PÁL, *Magy. Fiz. Folyóirat* (in the press, in Hungarian).
22. A. SCHULZE, *Zf. f. Metallk.*, **22**, 308, 1930.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ КОБАЛЬТА В СИЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Л. ПАЛ и Т. ТАРНОЦИ

Резюме

Для температурной зависимости дифференциальной восприимчивости кобальта в сильных магнитных полях были получены особые кривые с двумя максимумами. Разные части этих кривых могут быть объяснены на основе теории процессов вращения. При температуре 294° С имеется резкий локальный минимум дифференциальной восприимчивости. На основе измерений Саксмита и Томсона [13], проведенных на монокристалле кобальта, авторами была рассчитана теоретическая кривая дифференциальной восприимчивости поликристаллического образца в температурном интервале 240–350 °С при 1332 Ое. Сравнение экспериментальной кривой с теоретической показывает, что в непосредственной окрестности 290–300° С согласие очень хорошее. На теоретической кривой локальному минимуму дифференциальной восприимчивости соответствует 293° С, что отличается от экспериментального значения только на один градус. В последней части работы было исследовано влияние фазового превращения кобальта на ход кривой дифференциальной восприимчивости.

ON MULTIPLE MESON PRODUCTION IN MESON-NUCLEON COLLISIONS AT VERY HIGH ENERGIES

By

E. FRIEDLÄNDER*

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE OF PHYSICS, DEPARTMENT FOR COSMIC RAYS, BUDAPEST

(Presented by L. Jánossy. — Received 26. XII. 1955)

The effects of any difference between the distributions of mass density within mesons and nucleons on the meson showers resulting from very high-energy meson-nucleon or nucleon-nucleon collisions are investigated. It is shown that by a reasonable choice of the mass-density distributions one can explain most of the rougher features of meson showers on strictly kinematical grounds, without reference to any special theory of the interaction. Such must be used only to compute the multiplicity of the shower. An analysis of the very few accurately measured cases shows that the observed multiplicity can be explained by any one of the principal existing theories. It is concluded that only a great many experiments can decide in favour of one particular theory.

I. Introduction

During the last seven years, many authors [1—9] have investigated the phenomenon of multiple meson production in high-energy nuclear encounters. Although a great deal of experimental work has also been done (cf. [10] for detailed references) the problem is still far from being cleared up. The reason for this lies mainly in the difficulty of obtaining information on “pure collisions of fundamental particles”, since in most experiments at least one of the colliding particles is bound in a more or less complicated nucleus. Secondary interactions within the nucleus are then hardly avoidable [11—15], [10], and it is a rather difficult task to trace back — starting, say, from a “star” in the emulsion — the specific features of the elementary act. Since, on the other hand, continuous efforts are made to gather information on “free” nucleon-nucleon and meson-nucleon collisions, it seems worth while to investigate carefully which features of such events are characteristic for a certain theory (and could thus be used to test the latter) and which of them can be derived from very general considerations, including conservation laws and collision kinematics. It is the purpose of this paper to point out *one* of the possible approaches to this problem, consisting of the assumption that the distribution of mass density within the nucleon is different from that within the meson. It will be shown that some of the most striking features of the meson showers (such as : symmetry forward and back-

* On leave from the Institute of Physics, Academy of the Roumanian People's Republic. Bucharest.

ward in $n - n$ collisions in the center-of-mass (C) system [16], [17], two-component structure in the laboratory (L) system [18], dissymmetry in the C -system for $\pi - n$ collisions [19], concentration of a large fraction of the primary energy in a small number of secondary particles [20], [21], [17]) can be derived from this assumption and usual collision kinematics, without implying any special theory of the process. $\pi - n$ collisions will be treated in Sec. II, $n - n$ collisions in Sec. III, and a comparison with some experimental data will be made in Sec. IV.

II

We shall use a system of units such that $\hbar = c = M = 1$; M is the nucleon mass, μ the pion mass ($\mu \sim 0.15$). Unbarred symbols refer to systems of particles, barred ones to individual particles in the corresponding systems. The Lorentz factor of a particle or system of particles moving with velocity β is defined as

$$\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}. \quad (1)$$

Consider a central collision of a pion of velocity $\bar{\beta}_0$ with a nucleon at rest in the L -system. The relative velocity β_c of the C - and L -systems is given by

$$\beta_c = \mu (\bar{\gamma}_0^2 - 1) / (\mu \bar{\gamma}_0 + 1). \quad (2)$$

The Lorentz factor γ_c of the C -system is then

$$\gamma_c = (\mu \bar{\gamma}_0 + 1) / [1 + \mu^2 + 2\mu \bar{\gamma}_0]^{1/2}. \quad (3)$$

For very large $\bar{\gamma}_0$ (3) reduces to

$$\gamma_c \approx (\mu \bar{\gamma}_0 / 2)^{1/2}. \quad (4)$$

The total energy of all particles in the C -system is obtained by means of the Lorentz transform

$$E_c \gamma_c = \mu \bar{\gamma}_0 + 1, \quad (5)$$

whence

$$E_c = [1 + \mu^2 + 2\mu \bar{\gamma}_0]^{1/2} \approx (2\mu \bar{\gamma}_0)^{1/2} \quad (6)$$

for large $\bar{\gamma}_0$.

Let \bar{E}_c and $\mu \bar{\gamma}_c$ be the total energies of the two colliding particles in the C -system. The conservation laws for energy and momentum are

$$\begin{cases} \bar{E}_c + \mu \bar{\gamma}_c = 2\gamma_c, \\ (\bar{E}_c^2 - 1)^{1/2} = \mu (\bar{\gamma}_c^2 - 1)^{1/2}. \end{cases} \quad (7)$$

solving for $\bar{\Gamma}_c$ and $\bar{\gamma}_c$ we obtain

$$\begin{cases} \bar{\Gamma}_c = \gamma_c + (1 - \mu^2)/4\gamma_c, \\ \bar{\gamma}_c = \gamma_c/\mu - (1 - \mu^2)/(4\mu\gamma_c). \end{cases} \quad (8)$$

For very large γ_c (8) reduces to

$$\begin{cases} \bar{\Gamma}_c \approx \gamma_c, \\ \bar{\gamma}_c \approx \gamma_c/\mu \end{cases} \quad (8')$$

and hence

$$\bar{\Gamma}_c \approx \mu\bar{\gamma}_c.$$

Owing to the Lorentz contraction, the two colliding particles have in the $\bar{\gamma}$ -system the shape of two flattened disks (Fig. 1), with colinear centers. Consider

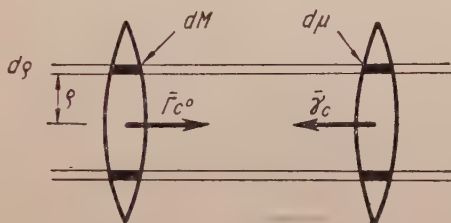


Fig. 1

now the space region enclosed by two coaxial cylinders with radii ϱ and $\varrho + \alpha\varrho$. The masses contained in the "nucleonic" and in the "mesonic" part of this region are, generally speaking, different, and depend on the distribution of mass density within the two particles. Let these distributions be $F(\varrho)$ and $f(\varrho)$. Then, for each value of ϱ we shall have to consider the collision of two "field packets" of masses*

$$\begin{cases} dM = 2\pi AF(\varrho)\varrho d\varrho, \\ d\mu = 2\pi af(\varrho)\varrho d\varrho. \end{cases} \quad (9)$$

$F(\varrho)$ and $f(\varrho)$ are normalized so that

$$\begin{cases} \int dM = 1, \\ \int d\mu = \mu. \end{cases} \quad (10)$$

$$F(\varrho) \neq f(\varrho), \quad (11)$$

* Similar ideas for non-central collisions of identical particles have been advanced by HABHA [8].

the center of mass C^* of the two packets is no longer at rest in the C -system but moves in it with a velocity β^* given by

$$\beta^* = [q(\bar{\Gamma}_c^2 - 1)^{1/2} - (\bar{\gamma}_c^2 - 1)^{1/2}] / (q\bar{\Gamma}_c + \bar{\gamma}_c), \quad (1)$$

where

$$q \equiv \frac{dM}{d\mu} = (A/a) [F(\varrho)/f(\varrho)]. \quad (2)$$

The Lorentz factor corresponding to β^* is:

$$\gamma^* = (q\bar{\Gamma}_c + \bar{\gamma}_c) / [1 + q^2 + 2q \{ \bar{\Gamma}_c \bar{\gamma}_c + (\bar{\Gamma}_c^2 - 1)^{1/2} (\bar{\gamma}_c^2 - 1)^{1/2} \}]^{1/2}. \quad (3)$$

For very large γ_c (14) reduces to

$$\gamma^* \approx (\mu q + 1) / 2(\mu q)^{1/2}. \quad (4)$$

The simplest assumption that can be made about $f(\varrho)$ is (cf. also [8])

$$f(\varrho) \sim e^{-\mu\varrho}. \quad (5)$$

We shall assume that a similar expression holds for $F(\varrho)$, say

$$F(\varrho) \sim e^{-\lambda\mu\varrho}, \quad \lambda \geq 1. \quad (6)$$

Then, using (9) and (10) we obtain easily

$$\mu q = \lambda^2 \exp [- (\lambda - 1)y], \quad (7)$$

where

$$y \equiv \mu\varrho, \quad (8)$$

and

$$\gamma^* = (1/2\lambda) \left[\exp \left(\frac{\lambda - 1}{2} y \right) + \lambda^2 \exp \left(- \frac{\lambda - 1}{2} y \right) \right]. \quad (9)$$

γ^* reaches its minimum value ($\gamma^* = 1$, i. e. $\beta^* = 0$), at a point

$$y_0 = (2 \ln \lambda) / (\lambda - 1). \quad (10)$$

Here the momentum of the fused packets changes its sign.

The total energy available for meson production in such a packet can be obtained by Lorentz transform from C^* to C

$$\gamma^* dE^* = (1 + q\mu) \gamma_c y e^{-y} dy \quad (11)$$

and hence

$$dE^* = 2 \gamma_c \lambda \exp \left[- \frac{\lambda + 1}{2} y \right] \gamma dy, \quad (12)$$

$$E^* = 2 \gamma_c \lambda \int_0^\infty \exp \left(- \frac{\lambda + 1}{2} y \right) y dy = E_c Z(\lambda), \quad (13)$$

where

$$Z(\lambda) = 4\lambda/(\lambda + 1)^2. \quad (25)$$

Fig. 2 shows the variation of γ^* with γ for different values of λ , Fig. 3 the variation of γ_0 and Z with λ .

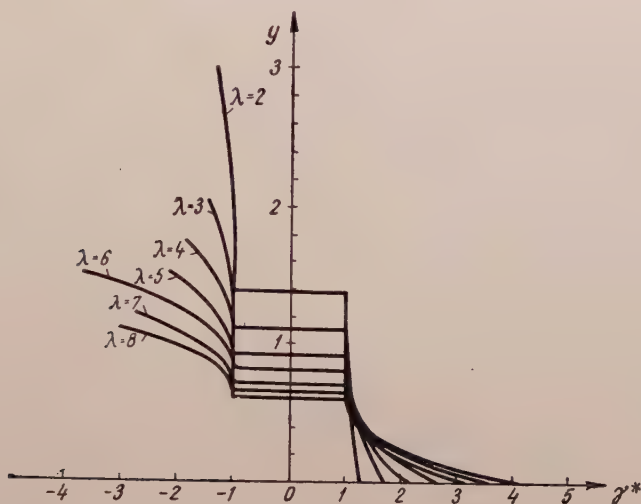


Fig. 2

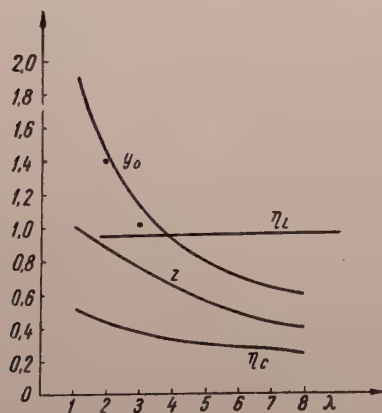


Fig. 3

Roughly speaking, most of the particles created within a cylinder of radius γ_0 will move towards the right in Fig. 1, while most of those in the outer region move towards the left. It will appear convenient in the following to call these regions "negative" and "positive" and to refer to particles created within these volumes as to "negative" and "positive" particles.

To obtain the total energy available for meson production in the positive volume ($y > y_0$), we integrate (23) from y_0 to ∞

$$E_+^* = E^* [1 + (\lambda + 1)y_{0/2}] \exp [-(\lambda + 1)y_{0/2}] . \quad (26)$$

The ratio

$$\eta_c = E_+^* / E^* \quad (27)$$

is also plotted in Fig. 3 against λ .

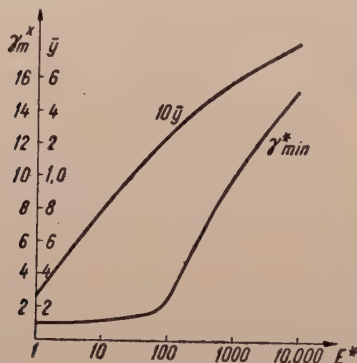


Fig. 4

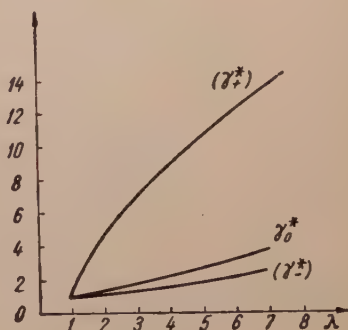


Fig. 5

As can be seen from Figs. 2 and 3, with increasing λ the fraction of particles created in the positive volume decreases, while their average energy in the C -system increases rapidly. It is also of interest to consider that part of the positive volume in which the available energy is just sufficient for the creation of one meson. The distance \bar{y} of this region from the shower axis and the corresponding (minimal) value γ_{\min}^* of γ^* are plotted in Fig. 4 against E^* for $\lambda = 7$. This shows that at least one particle of the positive volume appears with high energy and strong collimation ($\gamma_+^* \gg 1$) in the C -system. Weighting the different values of γ^* with weights proportional to the energy deposited in the corresponding zones and averaging over all values of y , we obtain the average values of γ^* for "positive" and "negative" particles. These are plotted in Fig. 5 as functions of λ , together with $(\gamma^*)_{y=0} \equiv \gamma_0^*$.

The fraction η_L of the total energy carried away in the L -system by the "positive" particles has also been plotted in Fig. 3. Comparing η_c and η_L we see that for large λ most of the energy is carried away by less than one third of the particles.

Thus one would expect a pion-nucleon collision at very high energies to show the following features: the secondaries are separated into two groups, one ("negative") includes most of the particles and has an almost isotropic distribution, with a slight tendency for backward emission, in the C -system:

the second group ("positive") consisting of very few (possibly even only one) particles is strongly collimated in the forward direction. The total energy available for meson production is smaller by a factor $z(\lambda)$ than the total available energy in the C -system.

III

The preceding analysis of meson-nucleon collisions may be also of use in the study of nucleon-nucleon interactions, since [5], [10], [23] the latter may be thought of in terms of exchanged (virtual) mesons. Such a model implies that each of the nucleons transfers a fraction α of its momentum to a pion which interacts with the other nucleon. Thus the observed meson shower is essentially the result of two meson-nucleon collisions, and to these we can readily apply the results obtained in Sec. II.

Denote by γ_c the "velocity" of the center-of-mass system C of the two nucleons which is related to the energy $\bar{\gamma}_0$ of the incoming nucleon by

$$\gamma_c = [(\bar{\gamma}_0 + 1)/2] \approx (\bar{\gamma}_0/2)^{1/2}, \quad (28)$$

and by

$$\xi \equiv 1 - 2\alpha \quad (29)$$

the "elasticity coefficient" of the collision.

In the C -system, both nucleons have equal and opposite momenta $\bar{\gamma}_c(\gamma_c^2 - 1)^{1/2}$ and total energies

$$\bar{\gamma}_c = \gamma_c. \quad (30)$$

Since only a fraction α of the nucleon momentum is carried by the meson, the center-of-mass C_1 of the meson-nucleon collision is not at rest in the C -system but moves with velocity

$$\beta_1 = \xi(\bar{\gamma}_c^2 - 1)/\bar{\gamma}_c \quad (31)$$

towards the left or right in the C -system (Fig. 7) depending on whether $\xi < 0$ or $\xi > 0$. The corresponding Lorentz factor is

$$\gamma_1 = (1 - \xi^2 \beta_c^2)^{-1/2}. \quad (32)$$

For $\gamma_c \gg 1$ and ξ not too near to $+1$ or -1 , γ_1 is practically independent of γ_c

$$\gamma_1 \approx (1 - \xi^2)^{-1/2}, \quad (33)$$

while for nearly elastic collisions ($|\xi| \approx 1$),

$$\gamma_1 \approx \gamma_c. \quad (34)$$

The total energy in the C_1 -system is given by

$$E_1 \gamma_1 = \gamma_c, \quad (3)$$

but owing to (24) only a fraction $z(\lambda)$ of E_1 can be effectively converted into mesons, the rest remaining as kinematic energy of the C^* -system. Thus the total energy available for meson production is only

$$E^* = z E_c / \gamma_1, \quad (3)$$

instead of

$$E_c = 2\gamma_c. \quad (3)$$

The different theories of multiple production [1-7] give all a power law: for the multiplicity n of the meson shower

$$n \sim E^{*g}. \quad (3)$$

In the FERMI-LANDAU theory, there appears also a factor $\gamma_c^{-1/4}$ owing to the Lorentz contraction of the collision volume. This reduces g from $3/4$ to $1/2$. If our model is valid, the contraction factor is no more γ_c but γ_1 (i. e. practically independent of γ_c) and the multiplicity increases with $\bar{\gamma}_0$ somewhat faster ($\sim \bar{\gamma}_0^{3/8}$) than in FERMI's original theory ($\sim \bar{\gamma}_0^{1/4}$). A similar result was obtained by FEINBERG and ČERNAVSKY [5] although from a quite different treatment of the collision: they assumed total absence of Lorentz contraction.

For most of the generated particles we expect from Fig. 2 an almost isotropic angular distribution in the two C_1 -systems. This means that they will be collimated in the C -system in two opposite cones, of half opening [24]

$$\text{tg } \theta_c = 3/\gamma_1. \quad (3)$$

Transformation to the L -system yields then the well-known two-cone structure, the narrow cone containing a small number of very energetic particles.

A rough approximation to the energy-angle correlation in the C -system can be obtained as follows: we shall assume that

$$\bar{\beta}^* \approx \beta^*, \quad (4)$$

further that in C^* all particles are emitted at right angles to the shower axis. Then the following relations hold

$$\begin{cases} \bar{\epsilon}_1 = \gamma^* \bar{\epsilon}^*, \\ \bar{\epsilon}_c = \bar{\epsilon}_1 \gamma_1 (1 \pm \cos \bar{\theta}_1) \\ \text{tg } \bar{\theta}_1 = 1/\gamma^*, \\ \text{tg } \bar{\theta}_c = (1/\gamma_1) \text{tg } (\bar{\theta}_1/2). \end{cases} \quad (4)$$

Denote by χ the ratio

$$\chi \equiv \bar{\epsilon}_c / \bar{\epsilon}^*, \quad (4)$$

and by ζ the quantity

$$\zeta \equiv \gamma_1 \operatorname{tg} \theta_c. \quad (43)$$

The double sign in (41) shows that the energy-angle correlation in the C -system is of different form, depending on whether $\xi > 0$ or $\xi < 0$. For $\xi > 0$ the correlation function for the "negative" particles is

$$\chi_- = (\gamma_1 / \zeta) [(1 - \zeta^2) / (1 + \zeta^2)] \quad (44)$$

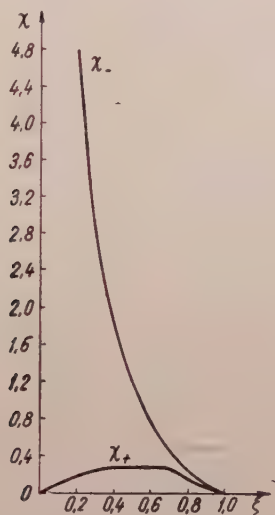


Fig. 5

and for the "positive" particles

$$\chi_+ = (\gamma_1 \zeta) [(1 - \zeta^2) / (1 + \zeta^2)]. \quad (45)$$

χ_- and χ_+ are plotted in Fig. 6 versus ζ . χ_- diverges at $\zeta = 0$, while $\chi_+ = 0$ at $\zeta = 0$ and $\zeta = 1$, and reaches a maximum

$$\chi_m \approx 0,3 \gamma_1 \quad (46)$$

at $\zeta \approx 0,5$. Thus, in the C -system some of the negative particles are emitted almost straight forwards or backwards with very high energies, while all "positive" particles appear with very low energies. The same picture in reverse holds for $\xi < 0$. Fig. 7 gives a schematic picture of the angular and energetic distributions which are to be expected for the two cases. For the sake of illustration it has been supposed that in all 12 particles have been produced and that $\gamma_c = 1/3$ so that in each of the two meson-nucleon collisions two particles come from the "positive" volume and four from the "negative" one. "Positive" particles are indicated by full lines, "negative" ones by dotted lines. The length of these lines should give an idea of the energy. As can be seen in Fig. 7, in case

A ($\xi < 0$), all the particles are confined within two cones, while in case *B* a few (low energy) particles can be found at angles near to $\pi/2$. At not too large γ such a distribution should not differ very much from isotropy.

Thus, for a nucleon-nucleon collision we expect a more or less pronounced two-cone structure in the *C*-system. Excepting a small number of high-energy particles (the collimation of which increases with increasing primary energy) the half openings of the two cones are independent of energy and depend only on ξ , which in turn must be related in some way or other to the impact parameter of the collision.

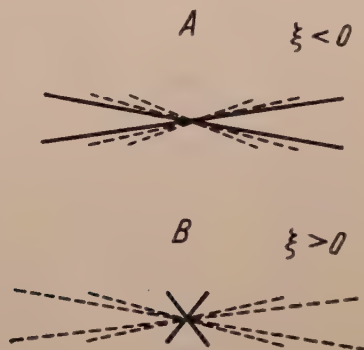


Fig. 6

IV

For a comparison with experiment we have chosen the only accurately measured jet of very high energy, known as the S-star [17], [18]. This jet shows a well-defined two-cone structure and all the interesting quantities can be computed with sufficient accuracy. These data are collected in Table I. Another event [20], quoted as the *HBD*-star is also analysed in Table I, although in this case it is more difficult to draw definite conclusions owing to the almost isotropical distribution in the *C*-system, which indicates a collision of type *A*. Two values are given for γ_c , viz.: $(\gamma_c)_\theta$, which is deduced from angular measurements only [16], [25], while $(\gamma_c)_E$ has been computed from the energies, measured by multiple scattering, in the *L*-system, in the following way:

If $\bar{\beta}_L \approx 1$, the Lorentz transform from *L* to *C* reads

$$\bar{E}_c \approx \gamma_c \bar{E}_L (1 - \cos \theta_L). \quad (4)$$

Summing for all particles we get first the ratio of the energy carried away in the *C*-system by the *observed* particles to the whole available energy

$$\varphi \approx (1/4) \sum_i \bar{E}_{Li} \bar{\theta}_{Li}^2 \quad (4)$$

and then

$$(\gamma_c)_\epsilon \approx (1/2) \left[\left(\sum_i \bar{\epsilon}_{Li} \right) / \varphi \right]^{1/2}. \quad (48)$$

$(\gamma_c)_\epsilon$ should be identical with $(\gamma_c)_\theta$ and equal to γ_c if the observed particles actually ensure momentum balance in the C -system. $(\gamma_c)_\theta = \gamma_c$ for forward-

Table I

Star	n_s	$(\gamma_c)_\epsilon$	$(\gamma_c)_\theta$	θ_τ°	γ_1	φ	Φ^{-1}	detected π^0
<i>S</i>	15	100 ± 25	~ 65	20	8	0,08	8	1
<i>HBD</i>	6	33 ± 3	21,1	~ 45	~ 3	0,1	~ 10	3

backward symmetry in C . As can be seen from Table I, there seems to be a significant difference between $(\gamma_c)_\theta$ and $(\gamma_c)_\epsilon$ for the *HBD*-star, while the *S*-star shows no such difference. This would either mean that in the *HBD*-star the number of undetected particles is somewhat larger than in the *S*-star, or that in the *HBD*-star there is some lack of forward-backward symmetry.

According to (35) a fraction $\Phi = \gamma_1^{-1}$ of the available energy in the C -system should appear as mesons. Assuming charge symmetry (i.e. $n_{\pi^\pm} \approx 2n_{\pi^0}$) we get the values listed in Table I ($\Phi = 1,5 \varphi$ for the *S*-star, $\Phi = \varphi$ for the *HBD*-star). This value is in good agreement with the value of γ_1 deduced from angular measurements on the *S*-star, but is rather high for the *HBD*-star. This could be accounted for by the presence of some undetected highly energetic neutral particles. As has been shown before, the same conclusion can be drawn from a comparison between $(\gamma_c)_\theta$ and $(\gamma_c)_\epsilon$, but then we must admit that the charge distribution shows a large fluctuation in the *HBD*-star. Considering the smallness of the total number of generated particles, such a fluctuation is however not improbable.

Considering the *S*-star as a type *A* collision ($\xi < 0$) and the *HBD*-star as a type *B* collision ($\xi > 0$) we get for ξ and α the values listed in Table II.

Table II

Star	ξ	α	μb
<i>S</i>	-0,992	0,996	0,004
<i>HBD</i>	0,943	0,003	3,6

The simplest assumption one can make about the dependence of a on the impact parameter b , is

$$a \sim e^{-\mu b}. \quad (49)$$

In Table II the product μb is also listed. Thus the *S*-star should be the product of an almost central collision, while the *HBD*-star seems to be a very distant one. It must be pointed out that, if (49) is valid, we should expect a maximum number of mesons to be generated at an impact parameter such that $\mu b \sim 0,7$ i. e. $a \sim 1/2$, $\xi \sim 0$, $\gamma_1 \sim 1$. Then a fraction $z(\lambda)$ of E_c can go into meson production and except for the few "positive" particles the angular distribution must be nearly isotropic. This might be the case in the star observed by TEUCHE [26] although its high multiplicity for a relatively low primary energy rather suggests a composite collision [13—15].

Finally, it is interesting to compare the multiplicities of the *S*- and *HBD* stars with the values to be expected according to the theories of FERMI and HEISENBERG for the observed values of E^* and γ_1 . These multiplicities have been computed for $\lambda = 3$ and $\lambda = 6,65$ and listed in Table III. The striking feature of both stars is the large difference in multiplicity for almost the same total available energy. The best fit is obtained with HEISENBERG's theory for $\lambda = 3$ for the *S*-star and $\lambda = 1/\mu$ for the *HBD*-star. This is not impossible since one may conceive that, in central collisions, heavy (*K*) mesons may play a greater role than in peripheric collisions, where light (π) mesons should prevail. This would tend to reduce the value of λ in central collisions. On the basis of momentum balance in the *C*-system, one might, on the other hand, postulate some more neutral pions in the *HBD*-star, and then $\lambda = 1/\mu$ would fit both cases (in HEISENBERG's theory). FERMI's theory yields not only too low values of the multiplicity, but, owing to stronger contraction of the interaction volume, also a smaller multiplicity for the *S*-star than for the *HBD*-star, which contradicts the experimental data. Again, one might assume that the mechanisms of production of the two stars are fundamentally different. Thus, for instance, the *HBD*-star might result from a free pion-nucleon collision. Then, evidently, the angular distribution is asymmetric in the *C*-system (cf. Sec. II). Hence

Table III

Star	$\lambda = 3$			$\lambda = 1/\mu$			n		
	E^*	n_F	n_H	E^*	n_F	n_H	observed	charge sym.	mom. bal.
<i>S</i>	18,8	11	26	10,5	7	17	16	22	16
<i>HBD</i>	E^* from θ	16,5	13	23	9,2	8	15	9	11
	E^* from ε	10,5	9	17	5,9	6	11		

the value of γ_c computed from the angular distribution in the L -system (assuming symmetry in C) is underrated. A rough estimate of this effect shows that under these conditions FERMI's theory can be easily fitted to the experimental data through a convenient choice of λ ($\lambda \sim 5.5$, which is not far from $1/\mu$). But then, to explain the S -star we must assume that it is not a pure nucleon-nucleon collision, but that more than one nucleon is involved in the process [13]. In our model, this increases the multiplicity by a factor $\nu^{3/4}$, where ν is the number of nucleons of the target nucleus swept away by the incident nucleon. A good fit with the experimental data is obtained for $\nu = 3$ which again is not an unreasonable assumption considering that two low-energy nucleons are also emitted from the target nucleus. (In bromine and silver nuclei one should expect on the average $A^{1/3} \sim 4 \dots 5$ collisions.)

Thus, either of the two theories can be shown to fit these experimental data (which, admittedly, are very few).

V. Concluding remarks

Several criterions have been advanced in the last years by different authors for testing the different theories of multiple production. Multiplicity, angular distribution and energy transfer have been used in turn. It was indeed a strong point in LANDAU's theory that a large fraction of energy should be always carried away by very few particles. As has been shown in the present paper, once our model of mass distribution is assumed, this feature of the energy transfer is a direct consequence of the conservation laws and is hence independent of any special theory. In an earlier work [27] it has been shown that the spatial distribution of large atmospheric showers which has been used to test the theories of FERMI and LANDAU [10] is also not a decisive criterion. It is easy to see that our model yields by itself practically all the rougher features of the existing theories. So, e. g. the average energy in the C -system is low (HEISENBERG) but small number of particles carry away most of the energy (LANDAU); the two-cone structure in C is independent of energy and depends only upon the impact parameter (FERMI), but the anisotropy of energy distribution increases with the primary energy (LANDAU). By an adequate choice of parameters, the observed multiplicity can be made to fit almost any of these theories.

Thus, considering the scarcity of experimental data it seems premature to assert that any one of the existing theories gives a (significantly) better fit than the other ones. Finer details of the energetic and angular distributions must be brought to light and more accurate measurements of high-energy jets are needed to decide upon the worth of such a theory. Until then, all assertions that a certain theory "fits" the data must be regarded with caution.

REFERENCES

1. G. WATAGHIN, *Phys. Rev.*, **63**, 137, 1943.
2. W. HEISENBERG, *Zs. f. Phys.*, **126**, 569, 1949.
3. H. LEWIS, R. OPPENHEIMER and G. WOUTHUYSEN, *Phys. Rev.*, **73**, 127, 1948.
4. E. FERMI, *Progr. Theor. Phys.*, **5**, 570, 1950; *Phys. Rev.*, **81**, 683, 1951.
5. E. FEINBERG and D. ČERNAVSKY, *Dokl. A. N. SSSR*, **81**, 795, 1951.
6. H. FUKUDA, *Phys. Rev.*, **89**, 842, 1953.
7. L. LANDAU, *Izv. A. N. SSSR, s. fiz.*, **17**, 51, 1953.
8. H. BHABHA, *Proc. Roy. Soc.*, **219A**, 293, 1953.
9. S. BELENKY, *Dokl. A. N. SSSR*, **99**, 523, 1954.
10. I. ROSENTHAL and D. ČERNAVSKY, *Uspehi Fiz. Nauk*, **52**, 185, 1954.
11. F. ROESLER and C. MCCUSKER, *Nuovo Cimento*, **10**, 127, 1953.
12. G. CORTINI, A. MANFREDINI and G. SEGRÉ, *ibid.* **9**, 859, 1951.
13. E. FRIEDLÄNDER, *St. Cerc. Fiz. (Bull. Phys. Inst. Bucharest, in Roumanian)* **6**, 63, 1954.
14. G. COCCONI, *Phys. Rev.*, **93**, 1107, 1954.
15. V. HABER SCHAIM, *Nuovo Cim. Suppl.*, **12**, 344, 1954.
16. M. KAPLAN and D. RITSON, *Phys. Rev.*, **88**, 386, 1952.
17. R. GLASSER, D. HASKIN, M. SCHEIN and J. LORD, *Phys. Rev.*, **99**, 1555, 1955.
18. J. LORD, J. FEINBERG and M. SCHEIN, *ibid.*, **80**, 970, 1950.
19. D. LAL, Y. PAL, B. PETERS and M. SWAMI, *Proc. Ind. Acad. Sci., A*, **36**, 75, 1952.
20. V. HOPPER, S. BISWAS and J. DARBY, *ibid.* **84**, 457, 1951.
21. N. GRIGOROV and N. MURZIN, *Izv. A. N. SSSR. s. fiz.*, **17**, 21, 1953.
22. B. ROSSI, *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 418, 1948.
23. W. KRAUSHAAR and L. MARKS, *Phys. Rev.*, **93**, 326, 1954.
24. R. MARSHAK, *Meson Physics*, 1952.
25. T. F. HOANG, *J. de Phys. Rad.*, **14**, 395, 1953.
26. M. TEUCHER, *Naturwiss.*, **37**, 260, 1950.
27. E. FRIEDLÄNDER, *Bull. Sci. Acad. Roum. P. R.*, in the press.

К ВОПРОСУ О МНОЖЕСТВЕННОМ РОЖДЕНИИ МЕЗОНОВ В СОУДАРЕНИЯХ МЕЗОНА С НУКЛОНОМ ПРИ БОЛЬШИХ ЭНЕРГИЯХ

Э. ФРИДЛЕНДЕР

Резюме

Цель настоящей статьи - исследовать влияние какой-нибудь разницы между распределениями плотности массы внутри нуклона и мезона на мезонные ливни, возникающие от высокоэнергетичных мезон-нуклон или нуклон-нуклон столкновений. Путем разумного выбора этих распределений становится возможным объяснить некоторые важные характеристики мезонных ливней, исходя только из кинематических соотношений, т. е. без привлечения какой-либо специальной теории взаимодействия. Это нужно только для вычисления множественности ливня.

Анализ (весьма малочисленных) аккуратных промеренных случаев показывает, что наблюдаемая множественность может быть объяснена с помощью любой из важнейших существующих теорий. Можно сделать вывод, что всякое утверждение того, что некоторая теория «подтверждена» экспериментом, необходимо рассматривать с крайней осторожностью.

UNTERSUCHUNG DER SPONTANEN KERNSPALTUNG AUF GRUND DES STATISTISCHEN KERNMODELLS

Von

D. KISDI

ORSCHUNGSGRUPPE FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER UNGARISCHEN AKADEMIE DER WISSEN-
SCHAFTEN, BUDAPEST

(Vorgelegt von P. Gombás. — Eingegangen: 27. I. 1956)

In der vorliegenden Arbeit wird die BOHR-WHEELERSche Theorie auf das statistische Modell der Atomkerne angewandt, wobei die Rolle der Oberflächenenergie von der Weizsäcker'schen kinetischen Energie übernommen wird. Bei Annahme von Yukawa-Kräften erhält man für die Ordnungszahl bzw. Massenzahl des schwersten stabilen Kernes die folgenden Werte:

$$Z_{\text{krit}} = 107;$$

$$A_{\text{krit}} = 266.$$

1. Einleitung

Die Theorie der spontanen Spaltung von Atomkernen wurde zuerst von BOHR und WHEELER ausgearbeitet [1]. Ihre Theorie beruht auf dem phänomenologischen Tröpfchenmodell der Atomkerne.

Ein Kern ist gegenüber spontaner Spaltung dann stabil, wenn die Variation der Bindungsenergie im Falle einer infinitesimal kleinen Deformation des Kernes positiv ist. Bei der Deformation bleibt der volumenproportionale Anteil der Bildungsenergie unverändert, es verändert sich nur die Coulombsche Wechselwirkungsenergie E_C der Protonen sowie die Oberflächenenergie E_F des Kernes. Aus der Forderung, dass die Energievariation $\delta E = \delta E_F + \delta E_C$ positiv zu sein hat, leiteten BOHR und WHEELER folgende Stabilitätsbedingung ab: $Z^2/A \leq 47,8$.

Mit Hilfe der bei schweren Kernen bestehenden Beziehung $A \approx \frac{5}{2}Z$ ergeben sich für die Ordnungszahl und Massenzahl des schwersten stabilen Kernes die folgenden Werte: $Z_{\text{krit}} = 120$ bzw. $A_{\text{krit}} = 300$.

In der vorliegenden Arbeit soll nun die Methode von BOHR und WHEELER auf das statistische Modell des Atomkernes angewandt werden. Wie zu sehen sein wird, übernimmt hier die Weizsäcker'sche kinetische Energie die Rolle der Oberflächenenergie. Die so durchgeführten Berechnungen ergaben für die Ordnungszahl des schwersten stabilen Kernes einen Wert von $Z_{\text{krit}} = 107$ und für dessen Massenzahl einen Wert von $A_{\text{krit}} = 266$.

2. Die statistische Theorie der Atomkerne

Auf Grund der von GOMBÁS [2] ausgearbeiteten statistischen Theorie der Atomkerne lässt sich in dem aus beliebig vielen (N) Neutronen und (Z) Pro-

tonen bestehenden Kern die Dichteverteilung der Nukleonen bzw. die Kernenergie im Gleichgewichtszustand verhältnismässig leicht bestimmen. Die Aufgabe wurde von GOMBÁS im Falle von Majorana-Kräfte auf Grund Minimumforderung der Energie so gelöst, dass zunächst die Energie als Funktion der Neutronendichte ϱ_n und der Protonendichte ϱ_p ermittelt wurde und dann jene Dichteverteilungen berechnet wurden, bei deren Vorhandensein die Energie $E(\varrho_n, \varrho_p)$ ein Minimum ist, wobei für ϱ_n und ϱ_p die folgenden Randbedingungen

$$\int \varrho_n dv = N, \quad \int \varrho_p dv = Z$$

bestehen. Es seien in diesem Abschnitt die Resultate von GOMBÁS kurz zusammengefasst.

In erster Linie ist also die Funktion $E(\varrho_n, \varrho_p)$ zu bestimmen. Die Energie E setzt sich aus fünf Termen zusammen:

$$E = E_K + E_J + E_A + E_C + E_R,$$

wo E_K die Fermische kinetische Energie der Nukleonen, E_J die Weizsäcker-Korrektur der kinetischen Energie, E_A die aus der Austauschwechselwirkung der Nukleonen resultierende Energie, E_C die elektrostatische Energie der Protonen und E_R die aus der elektrostatischen Wechselwirkung der Protonen herrührende Austauschenergie ist. Diese Energieterme sind als Funktion der Neutronen- und Protonendichte in I. hergeleitet worden. An Stelle der Nukleonendichten ist es zweckmässig, die folgenden dimensionslosen Grössen einzuführen:

$$\omega_n = (3\pi^2)^{1/3} r_0 \varrho_n^{1/3}; \quad \omega_p = (3\pi^2)^{1/3} r_0 \varrho_p^{1/3},$$

in denen r_0 den Wirkungskradius der Kernkräfte, d. h. den 2π -ten Teil der Comptonschen Wellenlänge der π -Mesonen bezeichnet. Der Wert von r_0 ist in I., (48) angegeben. Mit Hilfe der Grössen ω_n und ω_p lassen sich die Energieterme in einfacher Weise ermitteln. Der Ausdruck für die kinetische Energie E_K lautet wie folgt:

$$E_K = \frac{1}{5\pi^2} \frac{\hbar^2}{2Mr_0^5} \int [\omega_n^5 + \omega_p^5] dv,$$

wo M die Nukleonenmasse ist. Die Weizsäcker'sche Energie wird in der Form

$$E_J = \frac{3}{4\pi^2} \frac{\hbar^2}{2Mr_0^3} \int [\omega_n (\text{grad } \omega_n)^2 + \omega_p (\text{grad } \omega_p)^2] dv$$

und die Austauschenergie E_A in der Form

$$E_A = -\frac{\gamma}{r_0^4} \int [4f(\omega_n, \omega_p) + f(\omega_n, \omega_n) + f(\omega_p, \omega_p)] dv$$

beschrieben, wo γ die im Yukawa-Potential der Kernkräfte vorkommende Kopplungskonstante ist, deren Wert laut I. $\gamma = 66,24e^2$ beträgt (e ist die Elementarladung). Die in dem Ausdruck (6) stehende Funktion $f(\omega_n, \omega_p)$ ist durch I. Gl. (78) definiert.

Die elektrostatische Energie E_C kann folgenderweise angesetzt werden:

$$E_C = \frac{e}{2} \int V \varrho_p dv = \frac{e}{6\pi^2 r_0^3} \int V \omega_p^3 dv, \quad (7')$$

wo V das elektrostatische Potential der Protonenwolke bezeichnet und folgendermassen geschrieben werden kann:

$$V(r) = e \int \frac{\varrho_p(r')}{|r - r'|} dv' = \frac{e}{3\pi^2 r_0^3} \int \frac{\omega_p^3(r')}{|r - r'|} dv'. \quad (7'')$$

Schliesslich lautet der Ausdruck der Energieterme E_R wie folgt:

$$E_R = -\frac{1}{4\pi^3} \frac{e^2}{r_0^4} \int \omega_p^4 dv. \quad (8)$$

Die Summe dieser Energieterme liefert die Gesamtenergie als Funktion der Grössen ω_n und ω_p . Die nächste Aufgabe besteht in der Bestimmung jener Ausdrücke von ω_n und ω_p , die die Gesamtenergie zu einem Minimum machen und die den Randbedingungen (1) äquivalenten Normierungsbedingungen befriedigen:

$$\frac{1}{3\pi^2 r_0^3} \int \omega_n^3 dv = N, \quad \frac{1}{3\pi^2 r_0^3} \int \omega_p^3 dv = Z. \quad (9)$$

Die Grössen ω_n und ω_p , die die Lösung für das oben aufgestellte Variationsproblem bilden, werden offensichtlich nur Funktionen der vom Kernzentrum gemessenen Entfernung r sein, da die Kerne in ihrem Gleichgewichtszustand kugelsymmetrisch sind. Von GOMBÁS wurde nachgewiesen, dass die Grössen ω_n und ω_p im Falle des Vorhandenseins von Yukawa-Kräften in recht guter Näherung eine Gauss'sche Verteilung haben, also in folgender Form geschrieben werden können:

$$\omega_n = \omega_{n0} e^{-\frac{1}{3} a^2 \left(\frac{r}{r_0}\right)^2}, \quad \omega_p = \omega_{p0} e^{-\frac{1}{3} a^2 \left(\frac{r}{r_0}\right)^2}. \quad (10)$$

Werden diese Ausdrücke in die Randbedingungen (9) eingesetzt, so lassen sich die Normierungskoeffizienten von ω_{n0} und ω_{p0} wie folgt bestimmen:

$$\omega_{n0} = (9\pi)^{1/6} a N^{1/3}, \quad \omega_{p0} = (9\pi)^{1/6} a Z^{1/3}. \quad (11)$$

Setzt man in die Ausdrücke (4)–(8) der Energieterme die Ausdrücke (10) ein und eliminiert man mit Hilfe der Gleichungen (11) die Normierungskoeffizienten, so erhält man die einzelnen Energieterme als Funktionen des Parameters a .

Die Aufgabe besteht nun darin, jenen Wert a zu bestimmen, der die Gesamtenergie $E = E(a)$ zu einem Minimum macht.

Dieser Wert a , der im weiteren mit a_0 bezeichnet werden soll, entspricht dem Gleichgewichtszustand und der mit diesem a_0 berechnete Energiewert, der mit E_0 bezeichnet werden möge, ist die Energie des Kernes im Gleichgewichtszustand. Die so bestimmten Werte a_0 und E_0 sind ausserdem noch Funktionen der Massenzahl A und der Ordnungszahl Z :

$$a_0 = a_0(A, Z) \quad , \quad E_0 = E_0(A, Z) . \quad (13)$$

Bei einem gegebenen Wert von A sind also a_0 und E_0 noch Funktionen der Ordnungszahl Z , so dass man Parameterwerte a_0 und Energiewerte E_0 berechnen kann, die einer zu einem gewissen A gehörigen Isobarenreihe entsprechen. Die Energiewerte einer Isobarenreihe werden bei einem gewissen Wert von Z ein Minimum aufweisen, dem das stabilste Element dieser Isobarenreihe entspricht. Die stabilste Isobarenenergie sei hier mit E_{00} und der entsprechende Wert des Variationsparameters mit a_{00} bezeichnet. Die Ordnungszahl Z der stabilsten Isobars, ferner der Parameter a_{00} und die Energie E_{00} hängen ausschliesslich von der Massenzahl A der Isobarenreihe ab.

$$Z = Z(A) \quad , \quad a_{00} = a_{00}(A) \quad , \quad E_{00} = E_{00}(A) . \quad (14)$$

In I. wurden die Werte von Z , a_{00} und E_{00} für den Fall von mehreren Werten von A berechnet.

3. Die Bestimmung der Dichte des deformierten Atomkerns

Es sei angenommen, dass sich in einem Atomkern mit der Massenzahl A und der Ordnungszahl Z die der Gleichgewichtslage entsprechende Nukleonendichtevertellung infolge einer äusseren Einwirkung verändert, dass sich also der Kern deformiert. Der deformierte Kern wird nicht kugelsymmetrisch sein, doch sei hinsichtlich der Deformation angenommen, dass die Flächen $\varrho = \text{konst.}$ in der deformierten Kern achsensymmetrisch sind. Es wird der Radius jener Kugel mit R bezeichnet, auf der die Dichte des nichtdeformierten Kernes einen im vorgegebenen Wert ϱ hat. Es sei nun jene Fläche im deformierten Kern betrachtet, an der die Nukleonendichte denselben konstanten Wert ϱ haben wird. Die Gleichung dieser Fläche kann in der folgenden allgemeinen Form geschrieben werden:

$$r(\vartheta) = R(a_0 + a_1 \cos \vartheta + a_2 \cos^2 \vartheta + \dots) , \quad (15)$$

wo r und ϑ die üblichen Polarkoordinaten bezeichnen.

Falls angenommen wird, dass sich der Schwerpunkt des Kernes während der Deformation nicht verschiebt, so ist in der Reihenentwicklung (14) $a_1 = 0$

erster Näherung genügt es, die ersten zwei Glieder der Reihenentwicklung berücksichtigen. Man hat also :

$$r(\vartheta) = R(a_0 + a_2 \cos^2 \vartheta) = \frac{R}{g}(1 - \alpha \sin^2 \vartheta), \quad (15)$$

$$\alpha = \frac{a_2}{a_0 + a_2} \quad \text{und} \quad g = \frac{1}{a_0 + a_2}. \quad (15')$$

Es sei noch angenommen, dass die Deformation nur eine Formänderung sitzt, aber keine Kompression oder Dilatation des Kernes zur Folge hat. Es wird also gefordert, dass der durch die Fläche (15) eingeschlossene Rauminhalt genau so gross sei wie der einer Kugel mit dem Radius R .

$$\frac{2\pi}{3} \int_0^\pi r^3(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = \frac{4\pi}{3} R^3. \quad (16)$$

Setzt man dies in die Gleichung (15) ein, so gelangt man zu

$$\frac{1}{2g^3} \int_0^\pi (1 - \alpha \sin^2 \vartheta)^3 \sin \vartheta d\vartheta = 1. \quad (17)$$

aus dem Ausdruck (17) ergibt sich zwischen g und α die folgende Beziehung :

$$g = \left(1 - 2\alpha + \frac{8}{5}\alpha^2 - \frac{16}{35}\alpha^3\right)^{1/3}. \quad (18)$$

Setzt man die Gleichung (18) in den Ausdruck (15) ein, so erhält man die Gleichung der eine konstante Dichte aufweisenden Flächen des deformierten Kernes als Funktion des Deformationsparameters α .

Da die Nukleonendichten an der Oberfläche (15) genau so gross sind wie an der Oberfläche des nichtdeformierten Kerns an der Oberfläche der Kugel mit dem Radius R , wird die Verteilung der Grössen ω_n und ω_p folgende sein [vgl. die Gleichung (10)] :

$$\begin{aligned} \omega_n &= \omega_{n0} \exp \left\{ -\frac{1}{3} a_0^2 \frac{g^2}{(1 - \alpha \sin^2 \vartheta)^2} \frac{r^2}{r_0^2} \right\}; \\ \omega_p &= \omega_{p0} \exp \left\{ -\frac{1}{3} a_0^2 \frac{g^2}{(1 - \alpha \sin^2 \vartheta)^2} \frac{r^2}{r_0^2} \right\}. \end{aligned} \quad (19)$$

Hier sind a_0 , ω_{n0} und ω_{p0} die dem Gleichgewichtszustand des undeformierten Kernes entsprechenden Werte, für sie gelten also die Beziehungen (11). Die Ausdrücke von ω_n und ω_p befriedigen die Normierungsbedingungen (9) in gleicher Weise.

4. Die Energie des deformierten Atomkerns

Es soll nun die Energie des deformierten Kernes als Funktion des Deformationsparameters α bestimmt werden. Zu diesem Zwecke werden die Ausdrücke (19) von ω_n und ω_p der Reihe nach in die Energieterme (4)–(8) eingesetzt. Auf diese Weise erhält man für die Fermische kinetische Energie Ausdruck

$$\begin{aligned} E_K(\alpha) &= \frac{1}{5\pi^2} \frac{\hbar^2}{2Mr_0^5} \int [\omega_n^5 + \omega_p^5] dv = \\ &= \frac{1}{5\pi^2} \frac{\hbar^2}{2Mr_0^5} [\omega_{n0}^5 + \omega_{p0}^5] 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^\infty dr r^2 \exp \left\{ -\frac{5}{3} a_0^2 \frac{g^2}{(1 - \alpha \sin^2 \vartheta)^2} \frac{r^{22}}{r_0^{22}} \right\} \\ &= \frac{1}{5\pi^2} \frac{\hbar^2}{2Mr_0^5} [\omega_{n0}^5 + \omega_{p0}^5] \frac{1}{2g^3} \int_0^\pi (1 - \alpha \sin^2 \vartheta)^3 \sin \vartheta d\vartheta \int_0^\infty e^{-\frac{5}{3} a_0^2 \frac{R^2}{r_0^2}} 4\pi R^2 dR \end{aligned}$$

und nach Einsetzen der Gleichung (17):

$$E_K(\alpha) = \frac{1}{5\pi^2} \frac{\hbar^2}{2Mr_0^5} [\omega_{n0}^5 + \omega_{p0}^5] \int_0^\infty e^{-\frac{5}{3} a_0^2 \frac{R^2}{r_0^2}} 4\pi R^2 dR = E_K(0) .$$

Bei der Deformation tritt also keine Veränderung der Fermischen kinetischen Energie ein. Auf völlig gleiche Weise ergibt sich, dass sich auch die aus den Kernkräften und der elektrostatischen Wechselwirkung der Protonen resultierenden Austauschenergien nicht ändern:

$$E_A(\alpha) = E_A(0) \quad ; \quad E_R(\alpha) = E_R(0) .$$

Die nächste Aufgabe besteht jetzt in der Bestimmung der Weizsäcker'schen und Coulombschen Energien. Für die Weizsäcker'sche Energie erhält man den folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} E_J(\alpha) &= \frac{3}{4\pi^2} \frac{\hbar^2}{2Mr_0^3} \int [\omega_n(\text{grad } \omega_n)^2 + \omega_p(\text{grad } \omega_p)^2] dv = \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/3} c_0^2 A^{1/3} \frac{\hbar^2}{2Mr_0^2} \frac{1}{2g} \int_0^\pi \left[1 - \alpha \sin^2 \vartheta + 4\alpha^2 \frac{\cos^2 \vartheta \sin^2 \vartheta}{1 - \alpha \sin^2 \vartheta} \right] \sin \vartheta d\vartheta . \end{aligned}$$

o c_0 die nachstehende Konstante bezeichnet :

$$c_0 = 2 \left(3\pi^{1/2} \frac{A}{2} \right)^{1/3} a_0. \quad (24)$$

s sei die folgende Verkürzung eingeführt :

$$\begin{aligned} j(\alpha) &= \frac{1}{2g} \int_0^\pi \left[1 - \alpha \sin^2 \vartheta + 4\alpha^2 \frac{\cos^2 \vartheta \sin^2 \vartheta}{1 - \alpha \sin^2 \vartheta} \right] \sin \vartheta d\vartheta = \\ &= \frac{1}{g} \left(5 - 2\alpha - 4 \sqrt{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \arctg \sqrt{\frac{\alpha}{1-\alpha}} \right). \end{aligned} \quad (25)$$

Bei Benutzung dieser Bezeichnung und bei Einführung der Energieeinheit $\frac{16 e^2}{r_0} = 17,01 \text{ MeV}$ erhält man :

$$E_J(\alpha) = 0,1297 c_0^2 A^{1/3} j(\alpha) \varepsilon_0. \quad (26)$$

Im weiteren sollen nur noch infinitesimale Deformationen behandelt werden, so jene Fälle, wo α eine sehr kleine Zahl ist. In diesem Falle lässt sich $j(\alpha)$ durch die ersten zwei Glieder der Potenzreihe um $\alpha = 0$ ersetzen.

$$j(\alpha) = 1 + \frac{4}{9} \alpha^2 + \dots \quad (27)$$

$$E_J(\alpha) = 0,1297 c_0^2 A^{1/3} \left(1 + \frac{4}{9} \alpha^2 \right) \varepsilon_0. \quad (28)$$

Es bleibt noch die Coulombsche Energie zu bestimmen. Wird in den Ausdruck (7) der elektrostatischen Energie E_C die Dichte (19) des deformierten Kernes eingesetzt, so erhält man E_C als Funktion von α . Bei kleinen Deformationen lässt sich auch die Funktion $E_C(\alpha)$ durch die ersten zwei Glieder der Potenzreihe $\alpha = 0$ ersetzen. Auf diese Weise ergibt sich für die elektrostatische Energie der nachstehende Ausdruck :

$$E_C(\alpha) = 0,002250 c_0 \left(\frac{2Z}{A} \right)^2 A^{5/3} \left(1 - \frac{7}{45} \alpha^2 \right) \varepsilon_0. \quad (29)$$

Die zur Deformation des Kernes notwendige Energie $\delta E = E(\alpha) - E(0)$ setzt sich aus der Abänderung der Weizsäckerschen und Coulombschen Energie wie folgt zusammen :

$$\delta E = \delta E_J + \delta E_C = \left[0,1297 c_0^2 A^{1/3} \frac{4}{9} \alpha^2 - 0,00225 c_0 \left(\frac{2Z}{A} \right)^2 A^{5/3} \frac{7}{45} \alpha^2 \right] \varepsilon_0, \quad (30)$$

$$\delta E = 0,00140 c_0 \frac{Z^2}{A^{1/3}} \left(41,175 c_0 \frac{A^{2/3}}{Z^2} - 1 \right) \alpha^2 \varepsilon_0.$$

5. Die Stabilität des Atomkerns gegenüber spontaner Spaltung

Wenn die Deformationsenergie δE negativ ist, tritt die Deformation und Spaltung des Kerns spontan ein. Bei stabilen Kernen hat also der Ausdruck auf der rechten Seite der Gleichung (30) positiv zu sein. Bei Anwendung auf stabile Kerne wird somit die Bedingung $Z^2/A^{2/3} \leq 41,175 c_0$ erfüllt. Erhebt man die Ungleichung zur $3/4$ -ten Potenz, so ergibt sich:

$$\frac{Z^{3/2}}{A^{1/2}} \leq 16,25 c_0^{3/4}.$$

Aus dieser Bedingung kann man jene kritische Massenzahl berechnen, bei der ein aus mehreren Nukleonen bestehender Kern nicht stabil sein kann. Die in I. bestimmten Ordnungszahlen Z der stabilsten Isobare lassen sich im Falle schwerer Kerne aus der folgenden Formel ermitteln:

$$Z(A) = 0,4803 A - 0,0002863 A^2.$$

Der Parameterwert c_{00} , der dem Gleichgewichtszustand der stabilsten Isobare entspricht, ist im Falle schwerer Kerne durch die Formel

$$c_{00}^{3/4} \left(\frac{A}{Z} \right)^{3/2} = 13,05 + 0,01243 A$$

gegeben.

Setzt man die Formel (33) in die Beziehung (31) ein, so erhält man eine Ungleichung, aus der sich A_{krit} , die maximale Massenzahl der stabilen Kerne bestimmen lässt: wenn man nun diesen Wert A_{krit} in die Formel (32) einsetzt, dann gelangt man zu der maximalen Ordnungszahl der stabilen Kerne:

$$A_{\text{krit}} = 266 \quad ; \quad Z_{\text{krit}} = 107.$$

Es wurde also bewiesen, dass sich ein Atomkern, wenn seine Ordnungszahl grösser als 107 ist, spontan so deformiert, dass die Nukleonendichten den durch den Ausdruck (19) folgenden Gesetzen folgen. Diese Deformation führt im Endergebnis zur Spaltung des Kernes; die Elemente mit einer grösseren Ordnungszahl als 107 sind daher gegenüber spontaner Spaltung instabil.

Wenn nun die Ordnungszahl eines Atomkernes kleiner als 107 ist, bedeutet die durch den Ausdruck (19) beschriebene Deformation eine endothermische Veränderung, die also nicht spontan eintreten kann. Natürlich ist nicht ausgeschlossen, dass eine durch einen anderen Ansatz charakterisierte Deformation spontan eintreten wird. Als Endresultat ergibt sich also, dass die Zahl 107 nur eine obere Grenze der Ordnungszahl von stabilen Kernen bedeutet.

Die statistische Theorie der Atomkerne bezeichnet deshalb im vollen Einklang mit der Erfahrung die Werte 107 und 266 als obere Grenze für die Ordnungszahl bzw. Massenzahl von stabilen Kernen.

An dieser Stelle dankt der Verfasser Herrn Prof. Dr. P. GOMBÁS für seine zahlreichen wertvollen Ratschläge.

LITERATUR

- N. BOHR und J. A. WHEELER, Phys. Rev., **56**, 426, 1939.
P. GOMBÁS, Ann. d. Phys., (6) **10**, 253, 1952 bzw. Acta Phys. Hung., **1**, 329, 1952. Diese Arbeit wird im weiteren mit I. bezeichnet.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПОНТАННОГО ДЕЛЕНИЯ ЯДЕР НА ОСНОВЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЯДРА

Д. КИШДИ

Резюме

Обсуждается применение теории Бора-Веелера к статистической модели атомных ядер. Поверхностная энергия заменяется кинетической энергией Вейцеккера. При предположении сил Юкава, для порядковых и массовых чисел самых-тяжелых стабильных ядер получаются следующие значения:

$$Z_{\text{крит}} = 107; \quad A_{\text{крит}} = 266.$$



INVESTIGATION OF THE ENERGY SPECTRUM OF NEUTRONS FROM A Po-Be SOURCE WITH THE PHOTOGRAPHIC EMULSION METHOD

By

L. MEDVECZKY

NUCLEAR RESEARCH INSTITUTE OF THE HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES, DEBRECEN

(Presented by A. Szalay. — Received 20. II. 1956)

Thick-layered Be was bombarded with α -particles of a small-diameter Po preparation. The distribution of neutron-emission energy associated with the $\text{Be}^9(\alpha, n)\text{C}^{12}$ nuclear process was determined by the measurement of recoil-proton tracks incident in the nuclear emulsion. The energy spectrum obtained by the measurement of more than 12 000 tracks showed three maxima (1,3 ; 4,4 ; 6,9 MeV) and the observed upper limit of neutron energy was 10,7 MeV.

The distribution of energy observed showed considerable disagreement with results known from literature. This can be accounted for by the fact that the number of measurements contributing to the present result exceeds by far the number of measurements carried out by other authors. Furthermore the divergence of irradiation geometry offers a very favourable opportunity for observation when a source of small diameter is used.

Of the neutron sources produced by natural radioactive alpha rays it is the $\text{Be}^9(\alpha, n)\text{C}^{12}$ nuclear process which is associated with the most intensive neutron emission. In many cases polonium is preferred as an alpha source, by reason of its γ radiation having considerably smaller intensity than Ra or Rn. Furthermore its alpha energy is more homogeneous.

This fact explains why studies dealing with the investigation of the energy spectrum of neutrons from a Po-Be source abound in the literature. The subject has not lost its significance even at the present time. The various results [11, 12, 13] so far obtained agree in putting the highest limit of radiation at 11 MeV. The maximum of intensity has been determined in general as ranging from 2 to 5 MeV. However, as to the number and locus of maxima, as well as the proportion of intensities are considerable discrepancies.

The purpose of this study is to examine the energy distribution of fast neutrons, as they emerge from a Po-Be neutron source of small dimensions, with the photographic emulsion method.

Technique of measurement

Neutron source

For Po-Be neutron sources mostly the homogeneous compound of solute polonium and powdered beryllium is used, but the introduction of polonium on thin platinum foil into a beryllium cylinder is also customary [1]. The neutron

source used for the present measurements is rather similar to the latter, but of very small dimensions (Fig. 1). The 12 millicuries of polonium were volatilized onto a Pt-Ir disc of 3 mm in diameter, according to the technique elaborated by A. SZALAY [2]. Opposite to the disc, at a distance of 0.2 mm was placed the metallic beryllium in laminar form. The source was placed into a brass container of 5 mm wall thickness.

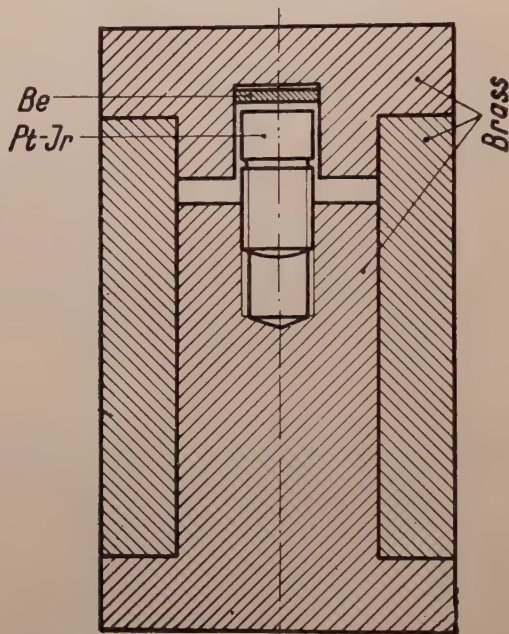


Fig. 1. Longitudinal section of the neutron source

Irradiation

Fig. 2 shows the irradiation geometry of the arrangement [3]. At irradiation the nuclear photographic plates were placed two by two in the plane of the beryllium at a distance of 40 or 100 mm from the centerline of the neutron source with their sensitive sides facing and wrapped up in aluminium foil and black paper. The direction homogeneity of the neutron beam striking the emulsion was very favourable for the small dimensions of the source, as the neutrons on the edges of the beam, entering at any point of the emulsion, were found to bound a maximum angle of 2° at a radiation range of 100 mm, and an angle less than 5° even at a distance of 40 mm. Even at such a short radiation range it became apparent how advantageous the application of a Po point source of small surface could be. Other authors were able to fulfil this condition only

the case of a considerably greater irradiation distance. The emulsions have been exposed to irradiation in several lots, each one for a different length of time, varying from 2 to 14 days.

The emulsion and its treatment

For research purposes Ilford C2 nuclear photographic plates with 100 micron thick emulsions have been used. The total area of the measured emulsion

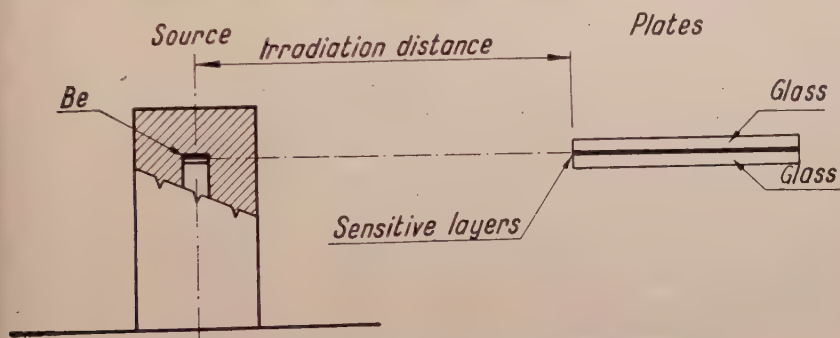


Fig. 2. Irradiation geometry of arrangement

was 229,5 cm². The irradiations occurred in the year 1951 two years after the manufacture of the emulsions, and thus they were quite old. Immediately before the irradiation it was absolutely necessary to eradicate different background tracks, which in the meantime had accumulated in the emulsion. The eradication was effected by saturated water vapour at $35 \pm 1^\circ \text{C}$ during 90 hours, after which the emulsions were dried in a desiccator. This procedure is essentially the same as that which has been outlined by WIENER and YAGODA [4]. However, the process took six times as long as stated by these authors.

The photographic plates were developed by a weak developer of hydroquinone, according to the process described by WIENER and YAGODA, but the length of time needed for the developing process was changed with the thickness of the layer. For maintaining the temperatures which were required by the developing process, home-made simple thermostats proved to be quite adequate, since they are light-proof wooden boxes with double walls and water-jackets. The mechanical "rocking" necessary for fixation was performed by a gramophone motor with the aid of an excenter disc.

Whether the development of the emulsions in the whole thickness of their layers was uniform or not, could be determined by an examination of the grain density of the proton tracks, which were to be found at different depths in the emulsion, i. e. by counting the grains of equal portions of equally long proton

tracks running at only slightly deviating angle to the plane of the emulsion. It is advisable when choosing such a portion of the track to avoid the slow end of proton tracks, where the grains almost wholly coalesce. To check the grain density the grains were counted at a magnification of 1700 times on a 55,2-micron portion of the track, next to the 13,8 micron portion adjoining the terminal grain.

In Fig. 3 is presented the average number of grains (\bar{q}) occurring in 1-micron lengths of the tracks incident at different depths below the surface of the emulsion.

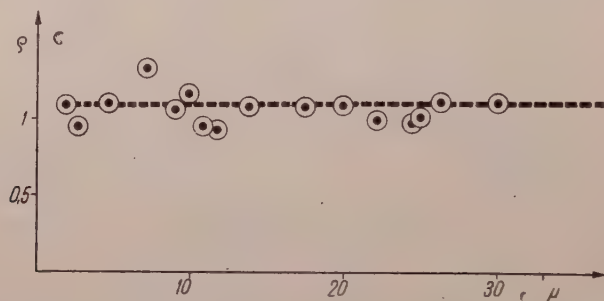


Fig. 3. Average number of grains on portions 1 micron long, in different depths of the developed emulsion. (To check the uniformity of development)

of the emulsion. It is evident from these measurements that the development of the emulsions in their entire depths was sufficiently uniform.

Microscope

Measurement of the majority of the track lengths was made with a Zeiss LgOG laboratory microscope, the objectives were Leitz-made immersion lenses of little depth of focus ($22\times$, $53\times$ and $100\times$) specially designed for research work of nuclear emulsions and with the use of a $6\times$ resp. a $12,5\times$ measuring ocular. Measurement of the rest of the tracks was made with a Leitz Ortholux II microscope with the same objectives. The length of the trajectories in the plane of the emulsion was measured by the aid of the screws for fine adjustment. The left side of the tube of the binocular microscope served for length measurement and the right one was used — with the aid of a home-made goniometric attachment — to measure the azimuth. The ocular scales were calibrated by a 1/100 object-micrometer.

The measurements were made by six persons, but the majority of the tracks was measured by two microscopists. In the case of every single observer the deviations between individual measurements were within the error limits.

observation and thus the results could be summed up. This sum total was verified by separate comparative measurements and by comparison with the individual results. (All the observers — independently of each other — measured the tracks of protons of 17 different energies, and repeated the measurements some days later on the length of the same tracks. The measurement of the length of tracks showed differences less than 2%, and the average error in the average value of the measurement of angles was found to be $0^{\circ}16'$).

Determination of the shrinkage factor

It is generally known that nuclear emulsions lose a great deal of their original layer thickness after development and fixation. The quotient of the layer thickness before and after the development is called the shrinkage factor and this has to be taken into consideration when computing the length of the tracks from their projection on a plane perpendicular to the emulsion. In our measurements the shrinkage factor was taken to be 2.7. This was determined by measuring the layer thickness both before and after the development with a micrometer gauge of 1 micron scale. In order to avoid deformation of the emulsion by the tip of the instrument, at every measurement the same microscopic cover-glass was interposed between the tip and the emulsion.

Range-energy relationship

The energy values corresponding to the tracks were determined in MeV, on the basis of the results reached by LATTES, FOWLER and CUER [5]. In plotting the relationship, however, we made use also of the extrapolations given by YAGODA [6] and BEISER [7], which refer to informations from the above mentioned three authors. According to earlier measurements of our own [3] the range-energy relationship of the eradicated plates agrees with the data furnished by LATTES, FOWLER and CUER, within the error limits of measurement.

Data and results of measurement

The determination of the energy of the neutrons accompanying the nuclear process was based on the measurement of recoil proton tracks. For external proton sources it is customary to use foils made of a compound of high hydrogen content. In our measurements the hydrogen contained in the gelatin served for proton source. Among the photographic emulsion methods for energy measurement of neutron point source, this one is the most universal. In our formulation

E_n is the energy of the neutron, E_p that of the proton and Θ is the angle bound by the direction of the neutron and proton. The relationship is expressed

$$E_p = E_n \cdot \cos^2 \Theta ,$$

which is valid after an elastic collision. The direction of the neutron was assumed to be the straight line connecting the centre of the bombarded beryllium target

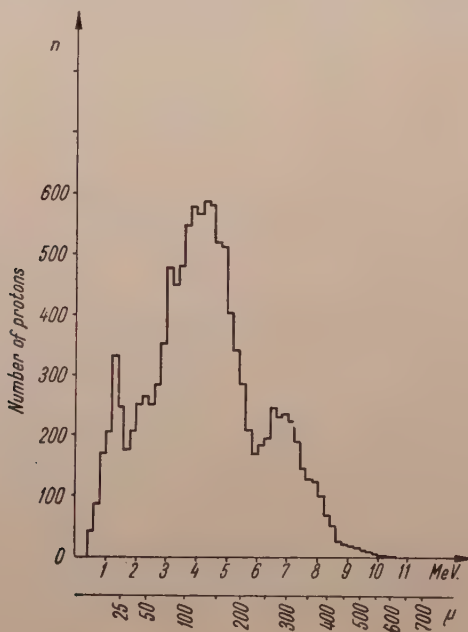


Fig. 4. Distribution of proton track energy as referred to the direction of 0° .
(Result of rough measurement without correction)

and the initial point of the produced proton track. In conjunction with the results of measurement only the proton tracks, incident in a cone angle 10° half-open to the above direction, were taken into account. The results were related to the direction of the neutron which produced them. The energy distribution is illustrated in Fig. 4 as the sum total of results from microscopic measurements of 12315 tracks.

Background of observations Corrections

In order to obtain the correct energy distribution of neutrons, the results of measurements given in Fig. 4 must be corrected because of

1. the background,
2. its dependence on the energy cross section of neutron-proton collision

3. the differing probability of occurrence, in the given emulsion thickness, of tracks of different lengths. (Geometric correction).

The background of measurements is not only caused by cosmic radiation, but also by the unfortunately abundant radioactive contamination of nuclear emulsions, resp. of the glass plates upon which the emulsions are mounted.

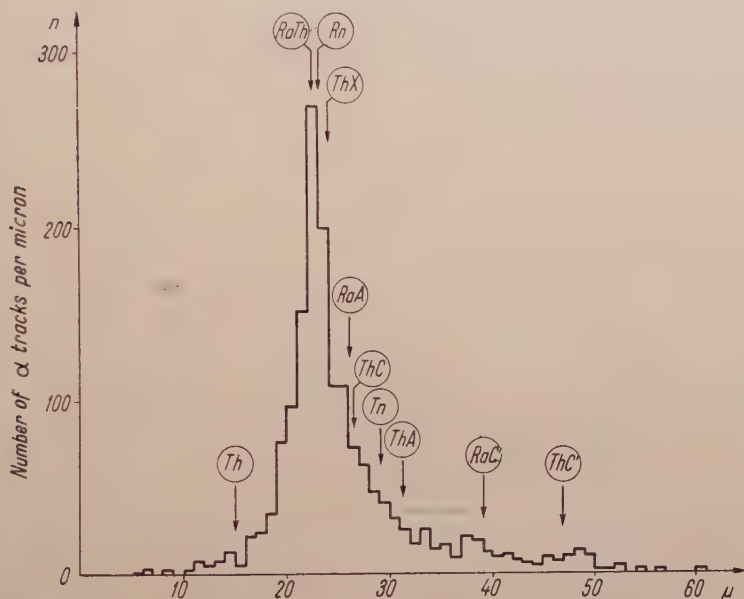


Fig. 5. Distribution of alpha tracks originating from the radioactive contamination of nuclear-type emulsions, according to their range in a non-irradiated emulsion. (n = number of alpha tracks per micron)

Regarding this fact several observations can be found also in the literature [8]. In order to obtain data in this respect we have made comparative measurements. Having developed — immediately after eradication — one half of a photographic plate eradicated in water vapour, at the best one or two tracks could be found in the emulsion. In the other half of the same plate, which was stored for 10—12 days in another building at a temperature and humidity about the same as used for the irradiated plates, but at a place made “proof against neutrons” 45—50 tracks could be measured in addition to a few neglected alpha stars.* The lengths of the tracks agreed with the lengths of natural radioactive

* Subsequent study was made of the problem whether the aforesaid radioactive contamination is actually a basic peculiarity of emulsions or merely the result of careless handling after the eradication. Accordingly, we have observed and checked all the incident tracks when examining the background, in order to reveal in which plane of the emulsion they reside. The tracks observed in the eradicated emulsions could only be found on the glass side of the emulsion layer, and beside the above mentioned number of tracks many were detected, which started out of the glass support, their complete lengths, however, did not fall into the area of the emulsion. On the other hand, contamination by careless handling would evidently have caused impurities, above all upon the surface of the emulsion.

alpha tracks. Comparative examinations were made of emulsions which had been developed a few months after the date of manufacturing but had not yet been irradiated, in order to establish the exact origin of the tracks, as well as to determine precisely the background of the measurement. These emulsions revealed a far greater number of tracks (nearly 2000 per 1800 mm²) whose distribution of length represented a sharp maximum at 23 microns (Fig. 5) and their directions were distributed spherically symmetrical according to the goniometric measurements. Therefore the tracks, incident in the 15° half-open cone angle and obtained from the comparative measurements in eradicated plates, can

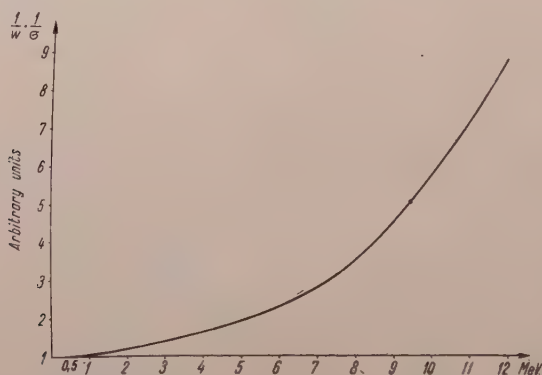


Fig. 6. Combined correction of a 100 micron thick emulsion.
(Geometric correction and correction of the energy cross section of n - p collision)

be considered to be the background of the measurements. The subtracted correction on account of the background is at a value 1.3 MeV 25 per cent and at the corrected energy under 2.5 MeV 9.7 per cent of these tracks.

As an exception, tracks longer than those illustrated in Fig. 5 also were observed, but their total was less than 0.2% of all the measured items and all of them had different lengths. These tracks originate from cosmic radiation and as they could not influence considerably the result of the measurement, they could be neglected in the determination of the background.

In the distribution obtained after the subtraction of the background, the two other necessary corrections were made. The differing probability of the occurrence (W) of tracks of various lengths in a 100 micron thick emulsion was computed according to RICHARDS [9]. The data on the relationship of the energy cross section of neutron-proton collisions (σ) were taken from the literature [10]. Fig. 6 shows the combined correction, which was obtained by multiplying the reciprocal of the two above values.

Distribution of neutrons according to their energies

Discussion

The distribution function obtained after the corrections is represented in Fig. 7. This may be regarded as the distribution of energy of the above-

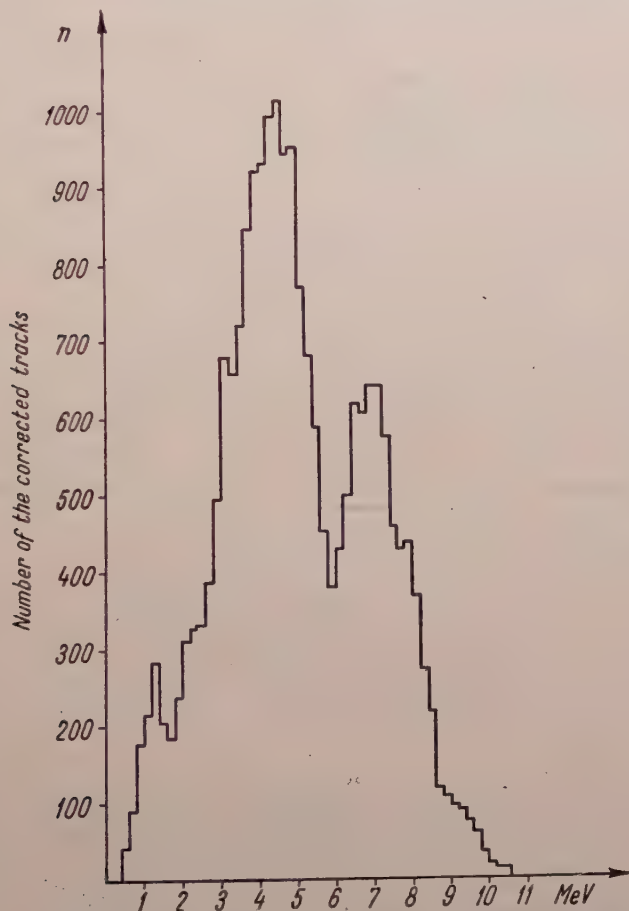


Fig. 7. Energy spectrum of the Po-Be neutron source on the basis of the measurement, with the necessary corrections

described Po-Be neutron source of small dimensions. Accordingly, the maximum energy of the neutron source resp. of the neutrons associated with the $\text{Be}^9(\alpha, n)\text{C}^{12}$ nuclear process is 10.7 MeV. In agreement with the energy distribution of neutrons at 1.3, 4.4 and 6.9 MeV, altogether three well-defined maxima are distinguishable. It would be a very dubious procedure to establish any further maxima. The greatest intensity appears at 4.4 MeV. In comparing the results of measurement with those well known from literature [11] as well as with more

recent results [12] (Fig. 8) e. g. with the much-quoted energy spectrum of WHITMORE and BAKER [11], an essential discrepancy is observed regarding the number and locus of maxima. This is especially striking in the case of the maximum of intensity, where our investigations resulted in only one defining maximum, against the two maxima at 3,2 and 4,8 MeV of the authors quoted.

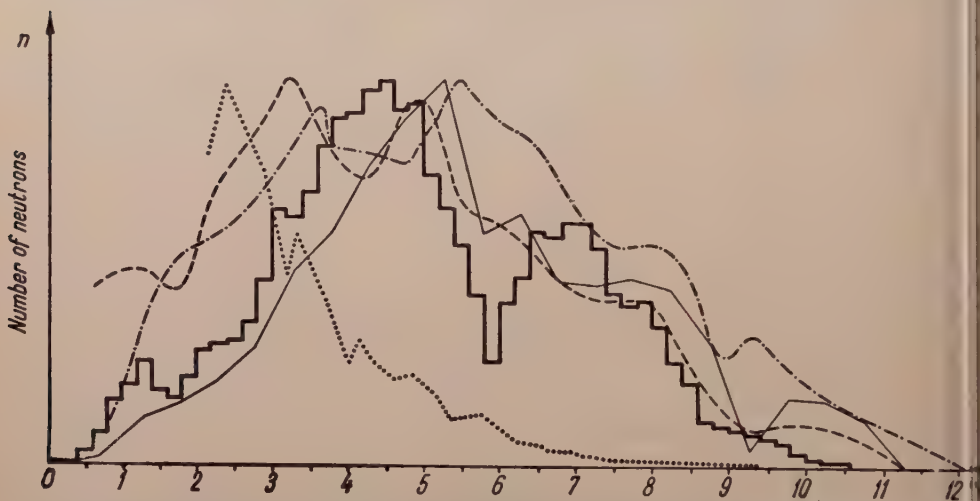


Fig. 8. Comparison of the Po-Be energy spectrum illustrated in Fig. 6 with some of the results from the literature. (Number of neutrons with identical ordinate value at the maximum, independent of the quantities of measurement)

- BERNARDINI (1936)
- DEMERS (1945)
- WHITMORE, BAKER (1950)
- .-.-.-.- ELLIOT, MCGARRY, FAUST (1954)

From the results of their measurements WHITMORE and BAKER conclude the certainty of a 2,5 MeV energy level for C^{12} . Several other authors also obtained a similar energy spectrum with different methods [12, 13] in more recent measurements. Nevertheless, as regards the distribution of neutron energy, there is a discrepancy when comparing with the measurements in thin layers by GUICHARD, BERTINI and ROBERTS [14]. These authors measured the neutron emission associated with the $Be^9(\alpha, n)C^{12}$ nuclear process in two directions (0° , 180°) relative to the direction of the neutron beam, and according to the results of their investigation, the emitted neutrons were found to belong to the stationary state and to two energy levels (4,2 and 7,5 MeV) of the C^{12} nucleus.

The writer has observed the same three groups of energy. The maximum at 6,9 MeV corresponds to the ground state and — in succession — the maximum at 4,4 MeV to the first (4,2 MeV) and finally the one at 1,3 MeV to the second (7,5 MeV) energy level.

The measurements were made with a thick Be layer and therefore it was natural that the spectrum revealed stripes partly covering one another instead of lines of energy. For this very reason the measurements were neither suitable for establishing the energy level of the C^{12} nucleus nor for modifying more recent data [15] of the literature on this subject. It may be definitely stated that in the distribution of neutron energy, according to the results of our measurements, there is no maximum corresponding to the energy level at 2.5 MeV.

The discrepancy still present between the results reported here and those by other authors must be attributed to the divergence in the neutron sources and to the geometry of the arrangement. Furthermore it must be ascribed to the small number of observations, on which the present conclusions are based, being by far greater than the number of observations by other authors. For the same reason the statistical straggling was much smaller in the results of our measurements.

I am greatly indebted to Professor A. SZALAY for his helpful interest in the investigations and his providing for the Po preparation. Likewise acknowledgement is made of the conscientious microscopic measurements of E. BUJÓSDÓ, MÁRTA HALÁSZ, FRANCISKA JOST, ELEONORE MEDVECZKY and IRÉN PERCZEL.

REFERENCES

1. J. W. SPINKS and G. A. R. GRAHAM, *Can. J. Research*, **28 A**, 60, 1950.
2. A. SZALAY, *Z. f. Phys.*, **112**, 29, 1938.
3. L. MEDVECZKY, *Fizikai Szemle*, **2**, 117, 1952.
4. M. WIENER and H. YAGODA, *Rev. Sci. Inst.*, **21**, 39, 1950.
5. C. M. G. LATTES, P. H. FOWLER and P. CUER, *Proc. Phys. Soc.*, **59**, 883, 1947.
6. H. YAGODA, *Radioactive Measurements with Nuclear Emulsion*, John Wiley & Sons, New York, 1949.
7. A. BEISER, *Rev. Mod. Phys.*, **24**, 273, 1952.
8. H. YAGODA and N. KAPLAN, *Phys. Rev.*, **73**, 634, 1948;
CHAS. H. MILLAR, *Can. J. Phys.*, **31**, 262, 1953;
S. DEUTSCH and E. C. DOOD, *Nuovo Cimento*, **10**, 853, 1953.
9. H. T. RICHARDS, *Phys. Rev.*, **59**, 796, 1941.
10. W. SLEATOR, *Phys. Rev.*, **72**, 207, 1947;
E. LAMPI, *Phys. Rev.*, **80**, 853, 1950;
E. BRETSCHER and E. B. MARTIN, *Helv. Phys. Acta*, **23**, 15, 1950;
Neutron cross section. A compilation of the AEC neutron cross section advisory group, AECU 2040, 1952;
E. M. HAFNER, W. F. HORNYAK, C. E. FALK, G. SNOW and T. COOR, *Phys. Rev.*, **89**, 204, 1953;
See also literature quoted by L. ROSENFELD, *Nuclear Forces*, Amsterdam, 1948, p. 121;
ROBERT K. ADAIR, *Rev. Mod. Phys.*, **22**, 249, 1950. Fig. 2.
11. G. BERNARDINI, *Zürcher Vorträge 1936*; L. E. BRETSCHER, *Kernphysik*, pp. 58—62, J. Springer, Berlin 1936;
P. DEMERS, *Nat. Research Council, Can. N. R. C. No. 1571*, 1945;
B. G. WHITMORE and W. B. BAKER, *Phys. Rev.*, **78**, 799, 1950.
12. J. O. ELLIOT, V. I. MCGARRY and W. R. FAUST, *Phys. Rev.*, **93**, 1348, 1954.
13. H. GURSKY, B. WINNEMORE and D. A. COWAN, *Phys. Rev.*, **91**, 209, 1953.
14. W. H. GUIER, H. W. BERTINI and J. H. ROBERTS, *Phys. Rev.*, **85**, 426, 1952.
15. F. AJZENBERG and T. LAURITSEN, *Rev. Mod. Phys.*, **27**, 77, 1955;
G. N. HARDING, *Proc. Phys. Soc., A*, **68**, 52, 1955.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА НЕЙТРОНОВ, ВЫХОДЯЩИХ ИЗ ИСТОЧНИКА Po-Be, МЕТОДОМ ЯДЕРНЫХ ЭМУЛЬСИЙ

Л. МЕДВЕЦКИ

Резюме

Мощный слой Be бомбардировался α -частицами, излученными препаратом малой поверхности. Распределение по энергиями излучения нейтронов, сопутствующее ядерной реакции $\text{Be}^9(\alpha, n)\text{C}^{12}$, определялось по измерениям следов оттолкнутой протоны возникших в ядерно-физической эмульсии, с учетом необходимых коррекций. Энергетический спектр, полученный из измерений 12 000 с лишним орбит, имеет три максимума (1,3 ; 4,4 ; 6,9 MeV), причем наблюдаемый верхний предел энергии нейтронов равен 10,7 MeV).

По сравнению с результатами, известными из литературы и относящимися к источникам нейтронов Po-Be, наблюдается значительное отклонение в распределении энергиям. Причины отклонения: настоящий результат основывается на значительном числе измерений, далее, геометрия облучения проявляет отклонение, что дает очень удобные возможности для наблюдения благодаря применению источника малой поверхности.

DIE HARTREE-FOCKSCHE METHODE IM FALLE EINES NICHTORTHOGONALEN EINELEKTRON- WELLENFUNKTIONEN-SYSTEMS

Von

P. SZÉPFALUSY

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER UNIVERSITÄT FÜR TECHNISCHE WISSENSCHAFTEN, BUDAPEST

(Vorgelegt von P. Gombás. — Eingegangen : 27. III. 1956)

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist zu untersuchen, welchem Gleichungssystem die «besten» dreidimensionalen Einelektronwellenfunktionen der Methode des »self-consistent field« genügen und welche Form die Energie des Atoms als Funktional dieser Wellenfunktionen annimmt, wenn für die Einelektronwellenfunktionen nicht die bekannte Orthogonalitätsbedingung vorgeschrieben wird.

1. Einleitung

Die Erörterung eines viele Elektronen enthaltenden Atoms als exaktes Wellenmechanisches Mehrteilchenproblem stellt wegen mathematischer Schwierigkeiten eine hoffnungslose Aufgabe dar. Infolgedessen ist man auf Näherungsverfahren angewiesen, von denen die zuerst von D. R. HARTREE formulierte Methode des »self-consistent field« am besten begründet ist [1]. Das Wesen dieser Methode besteht darin, dass jedes einzelne Elektron so betrachtet wird, als ob es sich im Felde des Atomkernes und der übrigen Elektronen in einem stationären Zustand befinden würde. Eine bessere theoretische Begründung der Methode des »self-consistent field« ist mit dem Namen von V. FOCK verknüpft [2]. FOCK wies nach, dass die Einelektronwellenfunktionen — wenn man die beste Näherung für eine Konfigurationswellenfunktion sucht, die das Produkt der dreidimensionalen Einelektronwellenfunktionen ist — gerade den HARTREESchen Gleichungen genügen werden.

Aus dem Pauliprinzip ergibt sich, dass die Konfigurationswellenfunktion der Elektronen antisymmetrisch zu sein hat. Aus diesem Grunde erhält man eine bessere Approximation, wenn man eine antisymmetrische Linearkombination des Produktes der dreidimensionalen Einelektronwellenfunktionen bildet. Wenn man nun annimmt, dass die dreidimensionalen Wellenfunktionen ein orthonormiertes Funktionensystem bilden, dann befriedigen diese Wellenfunktionen nach FOCK ein Gleichungssystem, das sich vom HARTREESchen Gleichungssystem in dem den Austausch der Elektronen ausdrückenden Glied unterscheidet. Erweitert man die Wechselwirkung zwischen den Elektronen um einen Austauschoperator, so besitzt die obenerwähnte anschauliche Deutung der Gleichungen des »self-consistent field« weiterhin unverändert Geltung.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist nun, die Gleichungen der Methode des »self-consistent field« von diesem Gesichtspunkt aus für jenen Fall zu untersuchen, wo nicht verlangt wird, dass die dreidimensionalen Einelektronwellenfunktionen orthogonal zu sein haben.

2. Die Methode des »self-consistent field«

Vorerst sollen jene Eigenschaften und Ergebnisse der Methode des »self-consistent field« zusammengefasst werden, die im nachstehenden zur unmittelbaren Anwendung gelangen [3].

Wenn man ein n Elektronen enthaltendes Atom mit der Methode des »self-consistent field« untersucht, so spaltet man den Zustand des Atoms in Eielektronenzustände, die durch die dreidimensionalen Wellenfunktionen gegeben sind. Bei Atomen mit abgeschlossenen Elektronengruppen stimmt die Zahl der Eielektronenzustände mit der Zahl der Elektronen des Atoms überein. Im nachstehenden soll nur dieser Fall behandelt werden, so dass n dreidimensionale Wellenfunktionen zu berücksichtigen sind:

$$\psi_1(q), \psi_2(q), \dots, \psi_n(q).$$

Hier bedeutet q die drei rechtwinkligen Koordinaten x, y, z und die Spinvariablen.

Die Wellenfunktion des Atoms ist aus diesen Eielektronwellenfunktionen so aufzubauen, dass sie über die das Pauliprinzip bedeutende antisymmetrische Eigenschaft verfügt. Eine solche entsprechende Wellenfunktion ist die Determinante der Eielektronwellenfunktionen:

$$\Phi = A \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \dots & \psi_1(q_n) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_n(q_1) & \dots & \psi_n(q_n) \end{vmatrix},$$

wo A ein Normierungsfaktor ist, der aus der die Normiertheit von Φ bedeutende Bedingung

$$\int \Phi^* \Phi dq_1 dq_2 \dots dq_n = 1$$

bestimmt werden kann (die konjugierten komplexen Grössen werden mit einem Stern bezeichnet). Hier ist $dq_1, dq_2 \dots dq_n$ das Volumenelement des Konfigurationsraumes, in dem auch die Spinvariable mit inbegriffen ist. Es lässt sich beweisen, dass dies die einzige mögliche antisymmetrische Linearkombination der Eielektronwellenfunktionen ist.

Die Wellenfunktion vom Typ (2) weist einige interessante Eigenschaften auf. Es ist ohne weiteres ersichtlich, dass die Eielektronwellenfunktionen

linear unabhängig sein müssen, da sonst die Determinante identisch verschwinden würde. So können z. B. zwei Eielektronwellenfunktionen, d. h. zwei Eielektronzustände nicht identisch sein, was der früheren Formulierung des Pauliprinzijs entspricht.

Die Eielektronwellenfunktionen ψ_k können als Komponenten eines n -dimensionalen Vektors ψ angesehen werden:

$$\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) . \quad (4)$$

Es sei C eine nichtsinguläre $n \times n$ -Matrix, die dem Vektor ψ einen anderen Vektor ψ^0 zuordnet:

$$\psi^0 = \psi C , \quad (5)$$

oder

$$\psi_k^0 = \sum_{l=1}^n \psi_l C_{lk} . \quad (5')$$

Aus dem Umstand, dass C nicht singulär ist, folgt, dass die Eielektronwellenfunktionen ψ_k^0 ebenfalls linear unabhängig sind.

Mit der Transformation (5) erhält man durch einfaches Rechnen aus (2), dass

$$\Phi = A^0 \begin{vmatrix} \psi_1^0(q_1) & \dots & \psi_1^0(qn) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_n^0(q_1) & \dots & \psi_n^0(qn) \end{vmatrix} , \quad (6)$$

so

$$A^0 \text{Det}(C) = A .$$

Es ist also ersichtlich, dass die mit den Eielektronwellenfunktionen ψ_k^0 gebildete Determinante einen ebensolchen physikalischen Zustand beschreibt, wie wenn man diese mit den Eielektronwellenfunktionen ψ_k gebildet hätte. Da die Funktionen ψ_k linear unabhängig sind, kann man immer die Transformationsmatrix C so wählen, dass die transformierten Eielektronwellenfunktionen ψ_k^0 ein orthonormiertes System bilden (was durch den Index 0 ausgedrückt werden soll), d. h.

$$\int \psi_k^0 * \psi_l^0 dq = \delta_{kl} , \quad (7)$$

wo dq das dreidimensionale Volumenelement ist, den Spin mit inbegriffen. Auf Grund einer solchen Bedingung gelangt man auf Grund von (3) zu

$$A^0 * A^0 = \frac{1}{n!} . \quad (6'')$$

Der Hamiltonoperator des vollständigen Atoms wird durch die Gleichung

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^n \mathbf{H}_{0i} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i=1}^n \sum_{k \neq i}^n \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|}$$

definiert. Hier bedeutet \mathbf{r}_i den Ortsvektor des i -ten Elektrons, e den Absolutwert der Ladung des Elektrons und \mathbf{H}_{0i} den Hamiltonoperator des sich allein im Feld des Atomkernes bewegendes i -ten Elektrons

$$\mathbf{H}_{0i} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \frac{Ze^2}{r_i},$$

wo \hbar die durch 2π dividierte Plancksche Konstante, m die Masse des Elektrons, Z die Ordnungszahl des Atoms und $r_i = |\mathbf{r}_i|$ ist. (Die unteren Indizes hängen nicht mit dem Begriff des Orthogonalität zusammen.)

Für die Energie des Atoms ergibt sich:

$$\epsilon = \int \Phi^* \mathbf{H} \Phi dq = \int \psi^{0*}(q) \mathbf{H}_0 \psi^0(q) dq + \frac{e^2}{2} \int \frac{\varrho_{qq'}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dq' dq.$$

Hier drückt $\varrho_{qq'} d\mathbf{q}' d\mathbf{q}$ die Wahrscheinlichkeit aus, dass sich irgendein Elektron des Atoms in der Nähe des Punktes q und irgendein anderes Elektron des Atoms in der Nähe des Punktes q' aufhält. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das i -te Elektron in der Nähe des Punktes q und das k -te Elektron in der Nähe des Punktes q' befindet, wird durch $v(q, q') d\mathbf{q}' d\mathbf{q}$ ausgedrückt, wo

$$\begin{aligned} v(q, q') &= \int \Phi^*(q_1, \dots, q_{i-1}, q, q_{i+1}, \dots, q_{k-1}, q', q_{k+1}, \dots, q_n) \\ &\quad \times \Phi(q_1, \dots, q_{i-1}, q, q_{i+1}, \dots, q_{k-1}, q', q_{k+1}, \dots, q_n) \\ &\quad \times dq_1 \dots dq_{i-1} dq_{i+1} \dots dq_{k-1} dq_{k+1} \dots dq_n. \end{aligned}$$

Da Φ antisymmetrisch ist, so ist $v(q, q')$ für jedes Elektronenpaar i, k gleich, so dass

$$\varrho_{qq'} = N(N-1) v(q, q') = \begin{vmatrix} \varrho(q) & \varrho(q, q') \\ \varrho(q', q) & \varrho(q') \end{vmatrix} = \varrho(q)\varrho(q') - |\varrho(q, q')|^2,$$

wo $\varrho(q) d\mathbf{q}$ die Wahrscheinlichkeit bedeutet, dass sich irgendein Elektron in der Nähe des Punktes q aufhält. $\varrho(q)$ ist daher die Dichte der n Elektronen im dem um die Spinvariable erweiterten dreidimensionalen Raum. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das i -te Elektron in der Nähe des Punktes q aufhält, wird durch $v(q) d\mathbf{q}$ ausgedrückt, wo

$$\begin{aligned} v(q) &= \int \Phi^*(q_1, \dots, q_{i-1}, q, q_{i+1}, \dots, q_n) \Phi(q_1, \dots, q_{i-1}, q, q_{i+1}, \dots, q_n) \\ &\quad \times dq_1 \dots dq_{i-1} dq_{i+1} \dots dq_n. \end{aligned}$$

Die Funktion $v(q)$ kann als Dichte des i -ten Elektrons betrachtet werden, und

da Φ antisymmetrisch ist, so ist sie für jedes Elektron gleich. Wendet man dies an, so ergibt sich:

$$\varrho(q) = n v(q) = \sum_{l=1}^n \psi_l^{0*}(q) \psi_l^0(q) = \psi^{0*}(q) \psi^0(q). \quad (13)$$

$\varrho(q, q')$ ist die Verallgemeinerung von $\varrho(q)$:

$$\varrho(q, q') = \psi^{0*}(q) \psi^0(q'), \quad (14)$$

$$\varrho(q, q') = \varrho(q), \quad (14')$$

die man nach DIRAC als Dichtematrix zu bezeichnen pflegt. Wesentlich ist, dass der Begriff der Dichtematrix an ein orthogonales Einelektronwellenfunktionen-System gebunden ist, da $\varrho(q)$ nur in diesem Falle die Form (13) der Einelektronwellenfunktionen annimmt.

Die nächste Aufgabe besteht im Suchen jener Einelektronwellenfunktionen ψ_i^0 , für die der Energieausdruck (9) das absolute Minimum erreicht, wobei die Einschränkung gilt, dass die Einelektronwellenfunktionen ψ_i^0 ein orthonormiertes Funktionensystem bilden, wie dies durch die Gleichung (7) ausgedrückt wird. Hieraus ergibt sich, dass die Einelektronwellenfunktionen das Gleichungssystem

$$\mathbf{H}^{F0} \psi^0(q) = \psi^0(q) \mathbf{E}^0 \quad (15)$$

zu befriedigen haben, das die am allgemeinsten bekannte Form der Fock-schen Gleichungen darstellt. \mathbf{H}^{F0} ist der Fock'sche Hamiltonoperator wie folgt:

$$\mathbf{H}^{F0} = \mathbf{H}_0 + U^0 + \mathbf{A}^0, \quad (16)$$

wobei \mathbf{H}_0 der durch die Gleichung (8') gegebene Operator, U^0 das Coulombsche Potential der dreidimensionalen Dichteverteilung nach der Formel

$$U^0 = e^2 \int \frac{\varrho(q')}{|r - r'|} dq' \quad (17)$$

und \mathbf{A}^0 der folgendermassen definierte Austauschoperator ist:

$$\mathbf{A}^0 \psi^0(q) = -e^2 \int \frac{\varrho^*(q, q') \psi^0(q')}{|r - r'|} dq'. \quad (18)$$

Die Grösse \mathbf{E}^0 bezeichnet die Diagonalmatrix der Energieparameter wie folgt:

$$\mathbf{E}^0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & & \\ & E_2^0 & \\ & & \ddots \\ & & & E_n^0 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Es sei nun die Dichte des l -ten Einelektronzustandes durch den Ausdruck

$$v_l^0 = \psi_l^{0*}(q) \psi_l^0(q) \quad (20)$$

definiert, deren Summe die Dichte der n Einelektronenzustände wie folgt angibt

$$N^0(q) = \sum_{l=1}^n \nu_l^0(q) = \psi^{0*}(q) \psi^0(q). \quad (1)$$

Laut der Beziehung (13) ist

$$N^0(q) = \varrho(q), \quad (2)$$

was die Möglichkeit bietet, im Falle eines orthogonalen Einelektronwellenfunktionen-Systems den durch die Gleichung (20) ausgedrückten Dichten der Einelektronenzustände folgende anschauliche Bedeutung zu geben. Stellt man sich nämlich die n Elektronen des Atoms in einer solchen Verteilung vor, dass sich in jedem Einelektronenzustand ein Elektron befindet, so kann man die Dichte des l -ten Einelektronenzustandes als Dichte eines im l -ten Einelektronenzustand befindlichen Elektrons ansehen, was auch dadurch unterstützt wird, dass

$$\int \nu_l^0 dq = 1, \quad (3)$$

da die Einelektronwellenfunktionen normiert sind. Die Summe der Dichten dieser Elektronen gibt dann wirklich laut der Gleichung (22) die Dichte der Elektronen. Es ist zu betonen, dass dies bloss eine anschauliche Deutung der Dichte der Einelektronenzustände ist, da nach der Wellenmechanik die Dichten der einzelnen Elektronen des Atoms einander und gemäss dem Ausdruck (1) bzw. (13) dem n -ten Teil der ganzen Dichte gleich sind.

Es seien nun die Verallgemeinerungen der Ausdrücke (20) und (21) analog wie bei der Gleichung (14) gedeutet:

$$\nu_l^0(q, q') = \psi_l^{0*}(q) \psi_l^0(q'), \quad (4)$$

$$\nu_l^0(q, q') = \nu_l^0(q), \quad (5)$$

und

$$N^0(q, q') = \sum_{l=1}^n \nu_l^0(q, q') = \psi^{0*}(q) \psi^0(q'), \quad (6)$$

$$N^0(q, q') = N^0(q). \quad (7)$$

Laut der Gleichung (14) hat die Beziehung

$$N^0(q, q') = \varrho(q, q') \quad (8)$$

Gültigkeit.

Analog zu den obigen Beispielen kann man auf Grund der Beziehungen (15), (16), (17), (18) und (19) das Element

$$E_l^0 = \int \psi_l^{0*}(q) \mathbf{H}^{F^0} \psi_l^0(q) dq = \int \psi_l^{0*}(q) \mathbf{H}^0 \psi_l^0(q) dq + \\ + e^2 \int \frac{\varrho(q') \nu_l^0(q)}{|r - r'|} dq' dq - e^2 \int \frac{\varrho^*(q, q') \nu_l^0(q, q')}{|r - r'|} dq' dq \quad (26)$$

der Matrix E^0 als die Energie der im l -ten Einelektronzustand befindlichen Elektronen betrachten.

Das erste Glied des Energieausdruckes (26) ist die kinetische Energie des fraglichen Elektrons und die aus der Wechselwirkung des fraglichen Elektrons mit dem Atomkern resultierende Energie, während das zweite und dritte Energieglied die Coulombsche und Austauschwechselwirkung dieses Elektrons mit den übrigen Elektronen zum Ausdruck bringen. Die Summe der Energien der verschiedenen Quantenzustände besetzenden einzelnen Elektronen

$$\sum_{l=1}^n E_l^0 = \int \psi^{0*}(q) \mathbf{H}^{F^0} \psi^0(q) dq = \epsilon - \frac{e^2}{2} \int \frac{\varrho_{qq'}}{|r - r'|} dq' dq \quad (27)$$

ist um die Wechselwirkungsenergie grösser als die durch die Gleichung (9) des Systems angeschriebene Gesamtenergie ϵ , da dieser Energieteil infolge der Summierung zweimal berücksichtigt wurde.

Auf Grund der Gleichung (15) kann man sich also — wie bereits eingangs erwähnt — tatsächlich vorstellen, dass sich die die Einelektronzustände besetzenden Elektronen im Feld des Atomkerns und der übrigen Elektronen in einem stationären Zustand befinden.

Es sei nun untersucht, wie sich die hier angeschriebenen Gleichungen im Falle nichtorthogonalisierter Einelektronwellenfunktionen ändern.

3. Die Gleichungen des »self-consistent field« im Falle nichtorthogonalisierter Einelektronwellenfunktionen

Es seien die in der Wellenfunktion (2) vorkommenden nichtorthogonalen Einelektronwellenfunktionen $\psi_i(q)$ in normierte Form gebracht:

$$\int \psi_i^*(q) \psi_i(q) dq = 1 \quad (28) \\ (i = 1, 2, \dots, n)$$

Bestimmt man den Normierungsfaktor A der Wellenfunktion (2) auf Grund der Beziehung (3), so wird man nicht einen ähnlich einfachen Ausdruck

erhalten wie den in der Gleichung (6'') angegebenen Wert von A^0 , sondern dieser Ausdruck wird das Integral der verschiedenen Produkte der Einelektronwellenfunktionen enthalten. Schon deshalb wird die Energie des Atoms, wenn man sie mit Hilfe der Wellenfunktion (2) nach der Gleichung (9) bildet, eine äusserst komplizierte Funktion der nichtorthogonalen Einelektronwellenfunktionen sein. Es sei bemerkt, dass die Wechselwirkungsenergie der Elektronen unverändert

$$\frac{e^2}{2} \int \frac{\varrho_{qq'}}{|r - r'|} dq dq'$$

betragen wird, wobei nur $\varrho_{qq'}$ ein anderer Ausdruck der Einelektronwellenfunktionen sein wird, als es im Falle der orthogonalen Einelektronwellenfunktionen war.

Zu den die Wellenfunktionen $\psi_i(q)$ bestimmenden Gleichungen gelangt man so, dass man jene Wellenfunktionen $\psi_i(q)$ sucht, für die die Energie des Atoms das absolute Minimum ist, wobei ausserdem auch noch die Nebenbedingung zu erfüllen ist, dass die Einelektronwellenfunktionen nach der Gleichung (28) normiert zu sein haben.

Die Auflösung des so gewonnenen Gleichungssystems stellt wegen der Kompliziertheit des Energieausdruckes und infolgedessen des ganzen Gleichungssystems eine hoffnungslose Aufgabe dar. Allerdings ist es auch nicht unser hauptsächlichstes Ziel, für die nichtorthogonalen Einelektronwellenfunktionen ein Gleichungssystem herzuleiten, das dem Gleichungssystem (15) äquivalent ist und dieses zu ersetzen vermag. Es soll hier lediglich untersucht werden, welchem Gleichungssystem die Einelektronwellenfunktionen $\psi_i(q)$ genügen, welches Gleichungssystem die orthogonalen Einelektronwellenfunktionen $\psi_i^0(q)$ und die Einelektronenergien E_i^0 enthalten kann, da diese auf Grund des Fock'schen Gleichungssystems (15) als bekannt angesehen werden können. Dabei soll auch gezeigt werden, dass es über dieses Ziel hinaus in einer gewissen Annäherung möglich sein wird, die orthogonalen Einelektronwellenfunktionen $\psi_i^0(q)$ und die Einelektronenergien E_i^0 zu eliminieren.

Zu diesem Zwecke sei die zu (5) inverse Transformation wie folgt gebildet:

$$\psi(q) = \psi^0(q) C^0, \quad (29)$$

oder

$$\psi_i(q) = \sum_{k=1}^n \psi_k^0(q) C_{ki}^0, \quad (29')$$

$$(i = 1, 2, \dots, n)$$

Hier ist C^0 die Reziproke der Matrix C . Die Existenz der Matrix C^0 ist mit Sicherheit anzunehmen, da ja vorausgesetzt wurde, dass C nicht singulär ist.

Da die Wellenfunktionen $\psi_i^0(q)$ und $\psi_i(q)$ gleicherweise normiert und die letzteren orthogonal zueinander sind, gelangt man auf Grund der Gleichung (29') zu der Beziehung

$$\sum_{i=1}^n C_{ki}^{0*} C_{ki}^0 = 1. \quad (30)$$

$(k = 1, 2, \dots, n)$

Auf Grund der Gleichung (29') lassen sich die Matrixelemente C_{ki}^0 folgendermassen schreiben:

$$C_{ki}^0 = \int \psi_k^{0*}(q') \psi_i(q') dq'. \quad (31)$$

$(i = 1, 2, \dots, n)$

Hieraus ist ersichtlich, dass wenn es eine Wellenfunktion $\psi_i(q)$ gibt, die zu einer Wellenfunktion $\psi_k^0(q)$ orthogonal ist, dann diese Wellenfunktion in der Entwicklung von $\psi_i(q)$ nicht vorkommen wird, da das zugeordnete Matrixelement C_{ki}^0 Null beträgt. Später, bei der konkreteren Angabe der Wellenfunktionen wird zu sehen sein, dass bei einem Teil der Eielektronwellenfunktionen dies der Fall sein wird. Ausserdem werden auch innerhalb des Wellenfunktionensystems $\psi_i(q)$ orthogonale Elemente vorhanden sein. Es seien also unter den Wellenfunktionen $\psi_i(q)$ orthogonale Wellenfunktionen zugelassen und nur gefordert, dass nicht sämtliche orthogonal sein dürfen.

Es sei nun die Transformation (29) auf das Focksche Gleichungssystem (15) angewandt:

$$\mathbf{H}^{F0} \psi(q) = \psi(q) \mathbf{E}^t \quad (32)$$

wo

$$\mathbf{E}^t = \mathbf{C} \mathbf{E}^0 \mathbf{C}^0. \quad (32')$$

Die Gleichung (32) hat nicht die gleiche Form wie die Gleichung (15), da der Operator \mathbf{H}^{F0} auch hier durch die orthogonalen Eielektronwellenfunktionen ψ_k^0 ausgedrückt ist.

Die Elemente der Matrix \mathbf{E}^t lassen sich aus dem Ausdruck (32') durch einfaches Rechnen ermitteln, wenn man die in der Gleichung (19) geschriebene Form der Matrix \mathbf{E}^0 verwendet:

$$E_{ki}^t = \sum_{l=1}^n C_{kl} E_l^0 C_{li}^0. \quad (33)$$

Zerlegt man so die Gleichung (32) in Komponenten, so erhält man:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{F0} \psi_i(q) &= \sum_{k=1}^n \psi_k(q) E_{ki}^t = E_i^0 \psi_i(q) - \sum_{l=1}^n C_{li}^0 \psi_l^0(q) \cdot (E_i^0 - E_l^0) = \\ &= E_i^0 \psi_i(q) - \int \sum_{l=1}^n (E_i^0 - E_l^0) \psi_l^{0*}(q') \psi_l^0(q) \psi_i(q') dq', \end{aligned} \quad (34)$$

wo die Beziehungen (5'), (29'), (31) und (33) benutzt wurden.

Es sei nun der folgende lineare Integraloperator definiert :

$$\mathbf{O}_i \psi_i(q) = \int \sum_{l=1}^n (E_i^0 - E_l^0) \psi_l^{0*}(q') \psi_l^0(q) \psi_i(q') dq', \quad (1)$$

wobei der Kern des Operators folgendermassen lautet :

$$(q | \mathbf{O}_i | q') = \sum_{l=1}^n (E_i^0 - E_l^0) \psi_l^{0*}(q') \psi_l^0(q). \quad (2)$$

Mit Hilfe dieses Operators wird die Gleichung (34) zu :

$$(\mathbf{H}^{F_0} + \mathbf{O}_i) \psi_i(q) = E_i^0 \psi_i(q). \quad (3)$$

$(i = 1, 2, \dots, n)$

Oder wenn man die Diagonalmatrix

$$\mathbf{O} = \begin{pmatrix} \mathbf{O}_1 & \mathbf{O}_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{O}_n \end{pmatrix} \quad (4)$$

definiert, lassen sich die Gleichungen (36) wie folgt zusammenfassen :

$$(\mathbf{H}^{F_0} + \mathbf{O}) \psi(q) = \psi(q) \mathbf{E}^0. \quad (5)$$

Es sei nun die Bedingung untersucht, bei der man in der Gleichung (36) anstelle der Operators \mathbf{H}^{F_0} den Operator \mathbf{H}^F setzen kann. Dieser Operator kann so aus \mathbf{H}^{F_0} gewonnen werden, dass man in \mathbf{H}^{F_0} anstelle von ψ^0 über ψ schreibt. Auf Grund der Beziehungen (16), (17) und (18) ergibt sich an

$$\mathbf{H}^F = \mathbf{H}_0 + \mathbf{U} + \mathbf{A}, \quad (6)$$

wo \mathbf{H}_0 auch jetzt der durch die Gleichung (8') gegebene Operator ist und wo

$$\mathbf{U} = e^2 \int \frac{N(q')}{|r - r'|} dq' \quad (7)$$

und

$$\mathbf{A} \psi(q) = -e^2 \int \frac{N^*(q, q') \psi(q')}{|r - r'|} dq'. \quad (8)$$

Hier ist $N(q)$, ähnlich wie bei Gleichung (21), die Dichte der n Einelektronenzustände im Falle des Wellenfunktionensystems ψ :

$$N(q) = \sum_{l=1}^n v_l(q) = \psi^*(q) \psi(q), \quad (9)$$

wo

$$v_l(q) = \psi_l^*(q) \psi_l(q) \quad (10)$$

die Dichte des l -ten Einelektronzustandes ausdrückt. Die Funktion $N(q, q')$ ist die Verallgemeinerung von $N(q)$ laut folgender Beziehung:

$$N(q, q') = \sum_{l=1}^n v_l(q, q') = \psi^*(q) \psi(q'), \quad (43)$$

$$N(q, q) = N(q), \quad (43')$$

wo

$$v_l(q, q') = \psi_l^*(q) \psi_l(q'), \quad (44)$$

$$v_l(q, q) = v_l(q). \quad (44')$$

Die naheliegendste Bedingung, um in der Gleichung (36') anstelle des Operators \mathbf{H}^{F0} den Operator \mathbf{H}^F schreiben zu können, ist

$$\mathbf{H}^F = \mathbf{H}^{F0}. \quad (45)$$

Hieraus ergibt sich, wenn man die Ausdrücke der Operatoren \mathbf{H}^{F0} und \mathbf{H}^F miteinander vergleicht und die Gleichungen (22) und (22') in Betracht zieht:

$$N(q, q') = N^0(q, q') \quad (45')$$

oder in anderer Form:

$$\sum_{l=1}^n \bar{\psi}_l^*(q) \psi_l(q') = \sum_{l=1}^n \psi_l^{0*}(q) \psi_l^0(q'). \quad (45'')$$

Dies ist eine notwendige und genügende Bedingung, damit die Transformation, deren Matrix \mathbf{C} bzw. \mathbf{C}^0 ist, unitär sei. Hieraus folgt dann, dass auch die Einelektronwellenfunktionen ψ_i ein orthonormiertes Funktionensystem bilden, was unserem Ziel und unserer Annahme widerspricht, so dass die Gleichung (45) nicht aufrechterhalten werden kann. Hieraus folgt des weiteren, dass jedesmal, wenn man auf ein nichtorthogonales Einelektronwellenfunktionen-System übergeht, die Beziehung

$$N(q) \neq N^0(q) = \varrho(q) \quad (46)$$

gilt, so dass man $N(q)$ und innerhalb dessen der Dichte der einzelnen Einelektronzuständen nicht eine so anschauliche Bedeutung geben kann, wie dies bei dem orthogonalen Einelektronwellenfunktionen-System im vorigen Abschnitt geschehen ist.

Es sei bemerkt, dass das Matricelement E_i^0 — da auf der rechten Seite der Gleichung (36') ähnlich wie in der Gleichung (15) ebenfalls die Matrix \mathbf{E}^0 vorkommt — auch jetzt als die Energie eines im i -ten Quantenzustand befindlichen Elektrons betrachtet werden kann. Man könnte sogar auch die diagonalen

Elemente der Matrix E^t als Energie der einzelnen Elektronen betrachten, da wie man sich auf Grund des Ausdrucks (33) durch einfaches Rechnen überzeugen kann — die folgende Gleichung besteht :

$$\sum_{i=1}^n E_i^0 = \sum_{i=1}^n E_{ii} . \quad (45)$$

Diese Gleichung bestätigt, wenn man die Beziehung (27) berücksichtigt, die Richtigkeit unserer obigen Behauptung. So könnte man ähnlich wie im Ausdruck (36) ein Gleichungssystem anschreiben, auf dessen rechter Seite statt E_i^0 stehen würde. Die in diesen Gleichungen vorkommenden Operatoren O_i würden keine Ausdrücke nach Gleichung (35) sein, sondern sich von diesen etwas unterscheiden. Da dieses Gleichungssystem vom Gesichtspunkt unserer sämtlichen späteren Überlegungen der Gleichung (36) völlig äquivalent ist, kann man hier von seiner Anschreibung absehen.

Die Tatsache jedoch, dass die Matricelemente auf der rechten Seite der Gleichung (36') als Energie der einzelnen Elektronen angesehen werden, für die Vorstellung, dass sich die Elektronen im Feld des Atomkernes und die übrigen Elektronen in einem stationären Zustand befinden, nicht genügen, da hierzu auch noch notwendig ist, dass die Summe der auf diese Weise berechneten Dichten der einzelnen Elektronen die Elektronendichte des Atoms ausmacht, was nach der Beziehung (46) nicht erfüllt wird.

Zurückkommend auf unser ursprüngliches Problem soll nun gezeigt werden, dass die Gleichung (45) nicht eine notwendige Bedingung für die Substitution des Operators H^{F_0} in der Gleichung (36') durch den Operator H^F ist. Es wird zu sehen sein, dass man in diesem Fall $N(q)$ unter gewissen Umständen als äquivalent der Funktion $\varrho(q)$ ansehen kann.

Um dies einzusehen, sei aus der Gleichung (36') die Summe der Einelektronenergien E_i^0 gebildet :

$$\sum_{i=1}^n E_i^0 = \int \psi^*(q) H^{F_0} \psi(q) dq + \int \psi^*(q) O \psi(q) dq . \quad (46)$$

Es sei noch gefordert, dass

$$\int \psi^*(q) H^{F_0} \psi(q) dq = \int \psi^*(q) H^F \psi(q) dq \quad (47)$$

sei, was auf Grund der Gleichungen (16) und (38) erfüllt wird, wenn

$$\begin{aligned} & \int \frac{N^0(q') N(q) - N^{0*}(q, q') N(q, q')}{|r - r'|} dq' dq = \\ & = \int \frac{N(q') N(q) - N^*(q, q') N(q, q')}{|r - r'|} dq' dq . \end{aligned} \quad (48)$$

Aus dieser Gleichung lassen sich mit Hilfe der Transformation (29) die Einglektronwellenfunktionen $\psi_i(q)$ eliminieren. Die so erhaltene Gleichung bedeutet, daß die orthogonalen Einglektronwellenfunktionen als bekannt angesehen werden, eine Beziehung zwischen den Elementen der Matrix \mathbf{C}^0 .

Aus dem Vergleich der Gleichungen (48), (49), (27) und (38) ergibt sich die Energie des Atoms zu

$$\epsilon = \int \psi^*(q) \mathbf{H}_0 \psi(q) dq + \int \psi^*(q) \mathbf{O} \psi(q) dq + \\ + e^2 \int \frac{N(q) N(q') - |N(q, q')|^2}{|r - r'|} dq' dq - \frac{e^2}{2} \int \frac{Q_{qq'}}{|r - r'|} dq' dq. \quad (50)$$

Es sei noch gefordert, daß folgende Beziehung bestehe:

$$\int \frac{N(q) N(q') - |N(q, q')|^2}{|r - r'|} dq' dq = \int \frac{Q_{qq'}}{|r - r'|} dq' dq, \quad (51)$$

die bei Berücksichtigung der Gleichungen (11), (22) und (22') der Beziehung

$$\int \frac{N(q) N(q') - |N(q, q')|^2}{|r - r'|} dq' dq = \int \frac{N^0(q) N^0(q') - |N^0(q, q')|^2}{|r - r'|} dq' dq \quad (51')$$

gleich ist. Diese Gleichung bedeutet ähnlich wie (49') eine Beziehung zwischen den Elementen der Matrix \mathbf{C}^0 .

Auf diese Weise erhält man für die Energie des Atoms:

$$\epsilon = \int \psi^*(q) \mathbf{H}_0 \psi(q) dq + \int \psi^*(q) \mathbf{O} \psi(q) dq + \\ + \frac{e^2}{2} \int \frac{N(q) N(q') - |N(q, q')|^2}{|r - r'|} dq' dq. \quad (52)$$

Auf Grund dieses Energieausdrucks wird man dann zu dem die Wellenfunktionen $\psi_i(q)$ bestimmenden Gleichungssystem gelangen, wenn man fragt, welche die Wellenfunktionen $\psi_i(q)$ sind, für die der Energieausdruck (52) das absolute Minimum erreicht, wobei noch die Nebenbedingung zu berücksichtigen ist, daß die Einglektronwellenfunktionen $\psi_i(q)$ normiert sind:

$$\delta \left(\epsilon - \sum_i E_i \int \psi_i^*(q) \psi_i(q) dq \right) = 0. \quad (53)$$

Nach einfachem Rechnen ergibt sich

$$(\mathbf{H}^F + \mathbf{O}) \psi(q) = \psi(q) \mathbf{E}, \quad (54)$$

wo

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_1 & E_2 & \dots & E_n \end{pmatrix}. \quad (55)$$

Auf diese Weise wurde tatsächlich eine der Gleichung (36') äquivalente Gleichung gefunden, in der anstelle des Operators \mathbf{H}^{F_0} der Operator \mathbf{H}^F steht. Der ganze Unterschied besteht darin, dass auf der rechten Seite der Gleichung anstelle der Matrix \mathbf{E}^0 die Matrix \mathbf{E} steht, was völlig unwesentlich ist, da man die einzelnen Elemente der Matrix \mathbf{E} ebenfalls als die Energie der im entsprechenden Quantenzustand befindlichen Elektronen betrachten kann. Auf Grund der Gleichung (49) gilt nämlich

$$\sum_{i=1}^n E_i^0 = \sum_{i=1}^n E_i . \quad (57)$$

Es sei nun der Operator \mathbf{O} näher untersucht. Vergleicht man die Ausdrücke (52) und (9) der Energie, so erhält man bei Berücksichtigung der Gleichung (51) für den hinsichtlich der Wellenfunktion ψ gebildeten Mittelwert des Operators \mathbf{O} :

$$\int \psi^*(q) \mathbf{O} \psi(q) dq = \int \psi^{0*}(q) \mathbf{H}_0 \psi^0(q) dq - \int \psi^*(q) \mathbf{H}_0 \psi(q) dq . \quad (58)$$

Da die Wechselwirkung zwischen Spin und Bahn vernachlässigt wurde, kann man die Einelektronwellenfunktionen in der Form

$$\psi_i^0 = \varphi_i^0(\mathbf{r}) \eta_{m_{si}}(\sigma) , \quad (59)$$

bzw.

$$\begin{aligned} \psi_i &= \varphi_i(\mathbf{r}) \eta_{m_{si}}(\sigma) \\ (i &= 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (59)$$

schreiben. Hier ist m_{si} die Spinquantenzahl, σ die Spinvariable und $\eta_{m_{si}}$ die normierte Spinfunktion. (Definitionsgemäss: $\eta_{m_{si}}(\sigma) = \delta \sigma_{m_{si}}$, wo δ das Kroneckersche Symbol ist.)

Ferner ist es bei der Approximation nach der Methode des »self-consistent field« üblich, die Einelektronwellenfunktionen φ_i^0 nach den sphärischen Koordinaten r, ϑ, φ so zu trennen wie im Falle eines zentralen Feldes. Es ist zweckmässig, diese Separation analog auch für die Einelektronwellenfunktionen φ_i auszuführen:

$$\varphi_i^0(\mathbf{r}) = R_i^0(r) Y_{l_i}^{m_i}(\vartheta, \varphi) , \quad (58)$$

$$\begin{aligned} \varphi_i(\mathbf{r}) &= R_i(\mathbf{r}) Y_{l_i}^{m_i}(\vartheta, \varphi) , \\ (i &= 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (59)$$

wo

$$Y_{l_i}^{m_i}(\vartheta, \varphi)$$

die nach der Beziehung

$$\begin{aligned} \int Y_{l_i}^{m_i*}(\vartheta, \varphi) Y_{l_i}^{m_i}(\vartheta, \varphi) d\omega &= 4\pi \\ (d\omega &= \sin \vartheta d\vartheta d\varphi) \\ (i &= 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (60)$$

ormierte, der Nebenquantenzahl l_i und der magnetischen Quantenzahl m_i zugeordnete Kugelflächenfunktion ist.

Die Funktionen $R_i^0(r)$ bzw. $R_i(r)$ sind reelle radiale Wellenfunktionen, für die die Normierungsbedingung folgenderweise lautet:

$$\int_0^{\infty} R_i^{02}(r) 4\pi r^2 dr = 1, \quad (61)$$

bzw.

$$\int_0^{\infty} R_i^2(r) 4\pi r^2 dr = 1. \quad (62)$$

($i = 1, 2, \dots, n$)

Die Separierung der Einelektronwellenfunktionen nach den Gleichungen (58), (58') bzw. (59), (59') ist für die Transformation (29) mit zwei Folgen verbunden. Einerseits werden auf der rechten Seite der Beziehung (29') nur jene Wellenfunktionen ψ_k^0 stehen, deren Neben-, magnetische und Spinquantenzahl der Neben-, magnetischen und Spinquantenzahl der Wellenfunktion ψ_i gleich sind. Das den übrigen zugeordnete Matrixelement C_{ki}^0 ist nämlich nach der Gleichung (31) Null, da die den verschiedenen Neben- oder magnetischen Quantenzahlen zugeordneten Kugelflächenfunktionen und die den verschiedenen Spinquantenzahlen zugeordneten Spinfunktionen orthogonal zueinander sind. Andererseits werden aus demselben Grund auch jene Wellenfunktionen ψ_i , deren Neben-, magnetische oder Spinquantenzahlen verschieden sind, orthogonal zueinander sein. Auf diese Verhältnisse bezog sich die Bemerkung nach der Gleichung (31).

Setzt man in die Gleichung (57) den Operator H_0 laut Ausdruck (8') ein, ferner die Ausdrücke (58), (58') und (59), (59') für $\psi_i^0(q)$ und $\psi_i(q)$, so erhält man die Beziehung

$$\int \psi^*(q) \mathbf{O} \psi(q) dq = \sum_{i=1}^n \left\{ \int \psi_i^{0*}(q) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi_i^0(q) dq - \int \psi_i^*(q) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi_i(q) dq \right\}, \quad (63)$$

wo Δ_r den radialen Teil des Laplaceschen Operators bezeichnet.

Nun wird p_{ri}^0 bzw. p_{ri} durch die Gleichung

$$-\hbar^2 \Delta_r \psi_i^0(q) = p_{ri}^{02}(r) \psi_i^0(q), \quad (64)$$

bzw.

$$-\hbar^2 \Delta_r \psi_i(q) = p_{ri}^2(r) \psi_i(q) \quad (65)$$

($i = 1, 2, \dots, n$)

als der radiale Impuls eines den i -ten Einelektronzustand besetzenden Elektro für den Fall eines orthogonalen bzw. nichtorthogonalen Einelektronwellenfunktionen-Systems definiert. (Es ist leicht einzusehen, dass diese Grösse wegen der Separation der Einelektronwellenfunktionen nur Funktionen von q sind.) Natürlich ist die Vorstellung des Impulses als Funktion des Ortes für die Wellenmechanik fremd. Aus diesem Grunde sind die Grössen p_{ri}^0 und p_{ri} als durch die Gleichungen (64) und (65) formell eingeführte Grössen zu betrachten. Die Benennung Impuls erscheint deshalb zweckmässig, da die halbklassischen Entsprechungen dieser Grössen tatsächlich Impulse sind.

Es sei noch gefordert, dass die Gleichung

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \int \psi_i^{0*}(q) \left[\frac{1}{2m} p_{ri}^{02} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi_i^0(q) dq = \\ = \sum_{i=1}^n \int \psi_i^*(q) \left[\frac{1}{2m} p_{ri}^{02} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi_i(q) dq \end{aligned} \quad (6)$$

gelte. Zusammen mit den Einelektronwellenfunktionen ψ_i^0 wird man auf Grund der Gleichung (64) auch die Impulse p_{ri}^0 als bekannt ansehen können, so dass diese Gleichung — ähnlich wie die Gleichungen (49') und (51') — eine Beziehung zwischen den Elementen der durch die Gleichung (29) definierten Matrix C^0 bedeutet.

Auf Grund der Beziehungen (64), (65) und (66) kann man die Gleichung (63) in folgender Form schreiben:

$$\int \psi^*(q) \mathbf{O} \psi(q) dq = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^n \int \psi_i^*(q) \left[p_{ri}^{02}(r) - p_{ri}^2(r) \right] \psi_i(q) dq. \quad (6')$$

Die Wellenfunktionen ψ_i und somit infolge der Gleichung (65) auch die Impulse p_{ri} sind nicht eindeutig bestimmt. Die Wellenfunktionen ψ_i werden mit Hilfe der Transformation (29) gewonnen. Unter den Elementen der Matrix C^0 dieser Transformation müssen die durch die Gleichungen (30), (49'), (51) und (66) gegebenen Beziehungen erfüllt werden. Diese Beziehungen geben im Falle von $(1s)^2$, $(2s)^2$ - und $(1s)^2$, $(2s)^2$, $(2p)^6$ -Konfigurationen um eine Beziehung mehr als die Anzahl der von Null verschiedenen Elemente der Matrix C^0 . In diesem Falle lässt sich die Anzahl der Beziehungen so reduzieren, dass man die linken bzw. rechten Seiten der Gleichungen (51') und (66) addiert und so die beiden Beziehungen auf eine einzige Beziehung reduziert. Allerdings wird jetzt die Beziehung (67) nicht befriedigt, und man wird nur sagen können, dass man im Energieausdruck (52) den hinsichtlich ψ gebildeten Mittelwert des Operators durch die rechte Seite der Gleichung (67) ersetzen kann. Hält man sich diese Einschränkung vor Augen, so wird es zu keinem Missverständnis führen, wenn

man auch in diesem Falle die Gleichung (67) als gültig betrachtet. Bei einer höheren Zahl von Elektronen kann man über einen Teil der Elemente der Matrix C^0 frei verfügen. Ausserdem liefern auch die Gleichungen (30), (49'), (51') und (66) mehrere mögliche Lösungen. Es ist nun jene Lösung dieser Gleichung zu wählen und die noch unbestimmten Matrixelemente so aufzustellen, dass der hinsichtlich der Wellenfunktion ψ gebildete Mittelwert des Operators der radialen kinetischen Energie ein Minimum ist:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(q) \Delta_r \psi(q) dq = \text{Minimum}, \quad (68)$$

oder in Komponenten

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi_i^*(q) \Delta_r \psi_i(q) dq = \text{Minimum}. \quad (68')$$

$$(i = 1, 2, \dots, n)$$

Diese Bedingung bedeutet, dass die radialen Anteile der Wellenfunktionen ψ_i so bestimmt werden sollen, dass sie einen je glatteren Verlauf aufweisen.

Setzt man aus der Gleichung (67) den Mittelwert des Operators \mathbf{O} in den Energieausdruck (52) unter den gleichen Bedingungen ein, bei denen die Gleichung (54) gewonnen wurde, so erhält man:

$$\left[\mathbf{H}^F + \frac{1}{2m} (p_{ri}^{02} - p_{ri}^2) \right] \psi_i(q) = E_i \psi_i(q). \quad (69)$$

$$(i = 1, 2, \dots, n)$$

Es ist nicht unbedingt notwendig, dass die in dieser Gleichung vorkommenden Eielektronenzustandsenergien E_i mit den in der Gleichung (54) stehenden Eielektronenzustandsenergien übereinstimmen, sondern es müssen nur ihre Summen auf Grund der Gleichung (67) miteinander übereinstimmen. Es kann zu keinerlei Missverständnis führen, dass die Eielektronenzustandsenergien in den Gleichungen (54) und (69) dieselbe Bezeichnung erhielten, so dass man von einer unterschiedlichen Bezeichnung absehen kann.

Schreibt man die Gleichung (69) auf Grund der Gleichungen (38), (59) und (59') ausführlich an, so gelangt man zu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi_i(q) + \frac{1}{2m} (p_{ri}^{02} - p_{ri}^2) \psi_i(q) + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} \psi_i(q) -$$

$$-\frac{Ze^2}{r} \psi_i(q) + U \psi_i(q) - \mathbf{A} \psi_i(q) = E_i \psi_i(q). \quad (69')$$

$$(i = 1, 2, \dots, n)$$

In dieser Gleichung eliminieren eigentlich die Glieder

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi_i(q) \quad \text{und} \quad \frac{1}{2m} p_{ri}^2 \psi_i(q)$$

einander auf Grund der Gleichung (65). Die Durchführung dieser Elimination ist jedoch aus folgendem Grunde nicht zweckmässig. Dieses Gleichungssystem lässt sich nämlich tatsächlich zur Bestimmung der Einelektronwellenfunktionen $\psi_i(q)$ benutzen. Wie bereits in einer anderen Arbeit des Verfassers [1]

nachgewiesen wurde, kann man $\frac{1}{2m} (p_{ri}^{02} - p_{ri}^2)$ bei Berücksichtigung der

Bedingung (68) in halbklassischer Näherung durch die Einelektronwellenfunktionen ψ_k ausdrücken. [Dies bildet den Grund und die Notwendigkeit der

Bedingung (68)!] Der so begangene Fehler wird gering sein, da in $\frac{1}{2m} (p_{ri}^{02}$

$- p_{ri}^2)$ zwei Energieglieder von gleicher Beschaffenheit vorkommen; bei beiden Gliedern wird man nun, wenn man auf die halbklassische Näherung übergeht, einen Fehler von ungefähr der gleichen Grösse begehen. Da die Differenz der beiden zu bilden ist, wird der begangene Fehler stark vermindert. In dieser Näherung darf also die Gleichung (69) als äquivalent der Gleichung (15) betrachtet und an ihrer Stelle verwendet werden.

In den Operatoren U und A in den Ausdrücken (39) bzw. (40) kann in Betracht der Form der Einelektronwellenfunktionen (59) die Integration über die Spinvariable explizit ausgeführt werden, wenn man berücksichtigt, dass die Quantenzustände — da ja Atome mit abgeschlossenen Elektronengruppen erörtert werden — paarweise mit Elektronen von gegensätzlicher Spinrichtung besetzt sind:

$$U = e^2 \int \frac{N(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv' \quad (39)$$

und

$$A \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{e^2}{2} \int \frac{N^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) dv', \quad (40)$$

wo dv' das räumliche Volumenelement ist und in Analogie zu den Gleichungen (41) und (43)

$$N(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^n \varphi_l^*(\mathbf{r}) \varphi_l(\mathbf{r}), \quad (70)$$

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{l=1}^n \varphi_l^*(\mathbf{r}) \varphi_l(\mathbf{r}'), \quad (71)$$

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = N(\mathbf{r}). \quad (71)$$

Die kugelsymmetrische Beschaffenheit von $N(\mathbf{r})$ im Falle von Atomen

mit abgeschlossenen Elektronengruppen folgt aus der Form (59') der Wellenfunktionen φ_i^0 .

Es ist offenbar, dass ähnlich hierzu die Elektronendichte des Atoms im dreidimensionalen Raum auf Grund der Ausdrücke (13) und (22) — da die Wellenfunktionen ψ_i^0 die Form (58) und (58') haben — folgendermassen geschrieben werden kann:

$$\varrho(r) = \sum_{i=1}^n \varphi_i^{0*}(r) \varphi_i^0(r) = N^0(r) \quad (72)$$

und in Analogie zu den Gleichungen (14), (25) und (22'):

$$\varrho(r, r') = \sum_{i=1}^n \varphi_i^{0*}(r) \varphi_i^0(r') = N^0(r, r'), \quad (73)$$

$$\varrho(r, r') = \varrho(r) = N^0(r). \quad (73')$$

4. Diskussion

Es wurde also für das Einelektronwellenfunktionen-System $\psi(q)$ das Gleichungssystem (69') gewonnen und ausserdem zuvor durch dieses Wellenfunktionensystem auch die Energie des Atoms durch die Gleichungen (52) und (67) ausgedrückt. Untersucht man diesen Energieausdruck, so ergibt sich mit Rücksicht auf die Gleichungen (49') und (51'), dass bei der Berechnung der Wechselwirkungsenergie der Elektronen die Grössen $N(q)$ bzw. $N(q, q')$ und die Grössen $N^0(q)$ bzw. $N^0(q, q')$ äquivalent sind. Darauf weist übrigens auch der Umstand hin, dass die Operatoren der Wechselwirkungsenergie in den Gleichungen (69') bzw. (36) ähnliche Ausdrücke der Grössen $N(q)$, $N(q, q')$ bzw. $N^0(q)$, $N^0(q, q')$ sind. Die letzteren stimmen laut Gleichung (22) bzw. (22') mit $\varrho(q)$ bzw. $\varrho(q, q')$ überein, d. h. mit der Elektronendichte in dem um die Binvariable erweiterten dreidimensionalen Raum bzw. mit der Dichtematrix. Es kann also die überaus bedeutende Folgerung gezogen werden, dass bei der Berechnung der Wechselwirkungsenergie zwischen den Elektronen die Dichte des Einelektronenzustandes $N(q)$ und die Elektronendichte $\varrho(q)$ durch einander ersetzt werden können:

$$\varrho(q) \sim N(q) = \sum_{i=1}^n v_i(q), \quad (74)$$

so $v_i(q)$ laut Gleichung (42) die Dichte des i -ten Einelektronenzustandes bezeichnet. Die oben hergeleitete Äquivalenz ermöglicht es, den Dichten dieses Einelektronenzustandes die gleiche anschauliche Bedeutung zu verleihen wie bei einem orthogonalen Einelektronwellenfunktionen-System. Man kann nämlich die Funktion $v_i(q)$ als die Dichte des den i -ten Quantenzustand besetzenden Elektrons ansehen und die vollständige Elektronendichte des Atoms als die Summe der Dichten der so verteilten n Elektronen erhalten. Man kann sich auf

Grund der Gleichung (66) vorstellen, dass die Dichten des $v_l(q)$ Einelektronzustandes gleichsam den Mittelwert von $v_l^0(q)$, nämlich den der Dichten durch das orthogonale Einelektronwellenfunktionen-System gegebenen Elektronenzustandes darstellen. In ähnlicher Weise bildet deren Summe im obigen Sinn den Mittelwert der Elektronendichte $\varrho(q)$.

Die vorstehenden Ausführungen sind offenkundig auch für den dreidimensionalen Raum nach Abtrennung der Spinvariablen gültig:

$$\varrho(r) \sim N(r) = \sum_{l=1}^n v_l(r), \quad (7)$$

wo

$$v_l(r) = \varphi_l^*(r) \varphi_l(r). \quad (7)$$

Hier ist $\varrho(r)$ bzw. $N(r)$ durch die Gleichung (72) bzw. (70) gegeben.

Die Gleichung (69) lässt sich also gemäss den Ausführungen nach Gleichung (69') in guter Näherung zur Bestimmung eines Systems der nichtorthogonalen Einelektronwellenfunktionen heranziehen, u. zw. in ähnlicher Weise wie die Gleichung (15) zur Bestimmung der orthogonalen Einelektronwellenfunktionen benutzt werden kann. Im Sinne der obigen Analogie besitzen fernere anschauliche Deutungen, die im 2. Abschnitt für orthogonale Einelektronwellenfunktionen begründet wurden, auch im Falle des nichtorthogonalen Einelektronwellenfunktionen-Systems $\psi(q)$ Gültigkeit.

Schliesslich sei erwähnt, dass die vorliegende Arbeit die Grundlage einer zweiten Arbeit [4] bildet, in der die WEIZSÄCKERSche Inhomogenitätskorrektur der statistischen Theorie des Atoms hergeleitet wird.

Es sei hier Herrn Professor Dr. P. GOMBÁS für seine wertvollen Ratschläge der beste Dank des Verfassers ausgesprochen.

LITERATUR

1. D. R. HARTREE, Proc. Cambridge Phil. Soc., **24**, 89, 1928.
2. V. FOCK, Zs. f. Phys., **61**, 126, 1930.
3. Die in diesem Abschnitt angegebenen Ergebnisse der Methode des »self-consistent field« sind (abgesehen von einigen unwesentlichen Abweichungen in der Gestalt der Beziehungen) enthalten in: P. GOMBÁS, Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, Birkhäuser, Basel, 1950, III. und VIII. Kapitel und F. SEITZ, Modern Theory of Solids, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1940, VI. und VII. Kapitel.
4. P. SZÉPFALUSY, Acta Phys. Hung. **6**, 293, 1956, Gl. (14).

МЕТОД САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ В СЛУЧАЕ СИСТЕМЫ НЕОРТОГОНАЛЬНЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ОДНОГО ЭЛЕКТРОНА П. СЕПФАЛУШИ

Резюме

Автор рассматривает вопрос, какой системе уравнений удовлетворяют «наилучшие» трехразмерные волновые функции одного электрона метода «self-consistent field», и каким выражением этих волновых функций будет энергия атома, если потребовать известного условия ортогональности от волновых функций одного электрона.

DIE INHOMOGENITÄTSKORREKTION DER FERMISCHEN KINETISCHEN ENERGIE VON TEILCHEN MIT HALBZAHLIGEM SPIN

Von

P. SZÉPFALUSY

PHYSIKALISCHES INSTITUT DER UNIVERSITÄT FÜR TECHNISCHE WISSENSCHAFTEN, BUDAPEST

(Vorgelegt von P. Gombás. — Eingegangen : 29. III. 1956)

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist nachzuweisen, dass der Ausdruck der durch die WEIZSÄCKERSche Korrektur erweiterten und von GOMBÁS modifizierten Energie der statistischen Atomtheorie auf Grund der von HARTREE und FOCK eingeführten wellenmechanischen Methode hergeleitet werden kann.

1. Das THOMAS-FERMISCHE statistische Atommodell und die HARTREE-FOCKSCHE wellenmechanische Methode stehen miteinander in einem engen Zusammenhang, was zuerst von DIRAC nachgewiesen wurde [1]. Die THOMAS-FERMI-DIRACSCHE Gleichung des statistischen Atommodells lässt sich nämlich aus der FOCKSchen Gleichung der Methode des »self-consistent field« herleiten, wenn man auf eine halbklassische Näherung übergeht, d. h. die Tatsache unberücksichtigt lässt, dass die Koordinaten und die kanonisch konjugierten Impulse nicht vertauschbar sind. Diese Näherung ist aber nicht imstande, Auskunft über die zuerst von WEIZSÄCKER eingeführte Inhomogenitätskorrektur [2] der FERMISCHEN kinetischen Nullpunktsenergie des statistischen Atommodells zu erteilen.

Der Verlauf der Elektronendichte approximiert im statistisch behandelten Atom die mit der wellenmechanischen Methode des »self-consistent field« gerechnete Dichte besser nach Einbau dieser Korrektur als ohne diese. Bei Untersuchung der Energiewerte erweist sich jedoch — wie aus einer Arbeit von SOKOLOW hervorgeht — die WEIZSÄCKERSche Korrektur in der statistischen Theorie der Elektronenhülle des Atoms als allzu gross, so dass sich z. B. beim Li^{+} -Ion eine um rund 20% höhere Energie als der richtige Energiewert ergibt [3]. GOMBÁS zeigte die Ursache dieser Erscheinung auf, indem er den Beweis erbrachte, dass bei der Berücksichtigung der WEIZSÄCKERSchen Korrektur ein Teil der kinetischen Energie zweimal in Rechnung gestellt wird [4]. Um diesen Fehler zu korrigieren, modifizierte GOMBÁS den statistisch gewonnenen Energieausdruck des Atoms und erhielt bei einer solchen Berechnung der Energie und des Dichteverlaufes der Atome eine sehr gute Übereinstimmung mit den empirischen bzw. mit den durch wellenmechanische Berechnungen erhaltenen Werten [5].

In einer vorhergehenden Arbeit des Verfassers [6] wurde die wellenmechanische HARTREE-FOCKSCHE Methode von dem Gesichtspunkt aus untersucht, in welcher Weise sich der Ausdruck der Energie des Atoms und die FOCKSchen

Gleichungen ändern, wenn man von einem orthogonalen Einelektronwellenfunktionen-System auf ein nichtorthogonales Einelektronwellenfunktionen-System übergeht. In der vorliegenden Arbeit soll nun nachgewiesen werden, dass sich die Inhomogenitätskorrektur des statistischen Atommodells bei Verwendung der dort gewonnenen Ergebnisse in der Weise aus den Fock'schen Gleichungen herleiten lässt, dass man halbklassisch deutbare Ausdrücke sucht, ohne im vorherigen Sinn genommene halbklassische Näherung überall anzuwenden. Als halbklassisch deutbare Ausdrücke sind jene zu betrachten, Funktionen der Elektronendichte sind, also die Wellenfunktion nur auf die Weise implizite enthalten. Die gewonnenen Ergebnisse bestätigen die obigen Überlegungen von GOMBÁS und unterstützen sie somit auch von dieser Seite.

2. Im nachstehenden seien die Ergebnisse der Arbeit [6] als bekannt angesehen, wobei diese Arbeit als I. zitiert werden möge.

Laut I. Gl. (69') kann der Hamiltonoperator des im i -ten Quantenzustand befindlichen Elektrons wie folgt geschrieben werden:

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r \psi_i(q)}{\psi_i(q)} + \frac{1}{2m} (p_{ri}^{02} - p_{ri}^2) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} + U^0 - A^0.$$

Da in der vorliegenden Arbeit halbklassische analoge Ausdrücke gesucht werden, war es zweckmässig, in diesem Hamiltonoperator U^0 an Stelle von U und A^0 an Stelle von A zu setzen. [Dies ist auf Grund von I. Gl. (51) offenbar ebenfalls weiteres möglich.] Werden U^0 und A^0 , diese wohlbekannten Operatoren der Coulombschen und Austauschwechselwirkung zwischen den Elektronen, durch orthogonale Einelektronwellenfunktionen ausgedrückt, so erhält man Gl. (17) und (18) in I.

$\psi_i(q)$ ist die Wellenfunktion des den i -ten Quantenzustand besetzenden Elektrons, das folgendermassen separiert wurde:

$$\begin{aligned} \psi_i(q) &= \varphi_i(r) \eta_{m_{si}}(\sigma), \\ \varphi_i(r) &= R_i(r) Y_{l_i}^{m_i}(\vartheta, \varphi), \end{aligned}$$

wo r, ϑ, φ sphärische Koordinaten bezeichnen und wo σ die Spinvariable m_{si} die Spinquantenzahl und $Y_{l_i}^{m_i}$ die der Nebenquantenzahl l_i und der magnetischen Quantenzahl m_i zugeordnete Kugelflächenfunktion ist. Die Wellenfunktion (2') unterscheidet sich insofern von der orthogonalisierten Wellenfunktion in I. Gl. (58'), als ihr radialer Anteil nicht der Orthogonalitätsbedingung unterworfen ist. Die den vom Winkel abhängigen Anteil beschreibenden Faktoren sind eine für beide Wellenfunktionen übereinstimmende Kugelflächenfunktion.

p_{ri}^0 bzw. p_{ri} bezeichnet den radialen Impuls des den i -ten Quantenzustand besetzenden Elektrons im Falle einer orthogonalisierten bzw. nicht

orthogonalisierten Einelektronwellenfunktion, die durch I. Gl. (64) bzw. I. Gl. (65) definiert ist. (Die oberen Indizes 0 stehen — ebenso wie in I. — stets mit dem Begriff der Orthogonalität in Zusammenhang.)

Die übrigen Bezeichnungen der Gleichung (1) sind folgende: \hbar ist die durch 2π dividierte Plancksche Konstante, m die Masse des Elektrons, e die elementare Ladung, Δ_r der radiale Anteil des Laplaceschen Operators und Z die Ordnungszahl des Atoms.

Es sei jetzt untersucht, welche halbklassischen analogen Ausdrücke den einzelnen Gliedern des in Gleichung (1) angeschriebenen Hamiltonoperators entsprechen.

Der Operator des ersten Gliedes dieses Hamiltonoperators lässt sich auf Grund der Separation (2) und (2') in der Form

$$E_i^W = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r \psi_i(q)}{\psi_i(q)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r R_i(r)}{R_i(r)} \quad (3)$$

schreiben.

Laut der Beziehungen I. (68) und I. (68') beträgt der hinsichtlich der Einelektronwellenfunktionen ψ_i gebildete Mittelwert des Operators der radialen kinetischen Energie ein Minimum. Infolgedessen liegt die Annahme auf der Hand, dass der radiale Anteil R_i der Wellenfunktionen ψ_i eine Funktion ist, die keine Nullstelle enthält. Eine überall positive, reelle Funktion kann jedoch als halbe Potenz ihres Quadrats geschrieben werden. Wenn man dies berücksichtigt, lässt sich auf Grund der Gleichungen (2') und (3)

$$E_i^W = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta_r v_i^{1/2}(r)}{v_i^{1/2}(r)} \quad (4)$$

schreiben, wo

$$v_i(r) = \varphi_i^*(r) \varphi_i(r) .$$

Nach den Ausführungen im 4. Abschnitt von I. kann man $v_i(r)$ als die Dichte eines den i -ten Quantenzustand besetzenden Elektrons betrachten, da

$$N(r) = \sum_{i=1}^n v_i(r) \quad (5)$$

vom Gesichtspunkt der Berechnung der Wechselwirkungsenergie der Elektronendichte $\varrho(r)$ äquivalent ist (ihren Mittelwert darstellt).

In der vorliegenden Arbeit soll $N(r)$ als Elektronendichte angesehen und dafür die Bezeichnung $\varrho(r)$ benutzt werden. Die halbklassisch berechnete Elektronendichte ergibt nämlich ohnehin den Mittelwert der wellenmechanisch berech-

neten Elektronendichte, wobei sie natürlich einen glatteren Verlauf aufweist. Es gilt also:

$$\varrho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^n v_i(\mathbf{r}) . \quad (5)$$

Den Elektronen in verschiedenen Quantenzuständen entsprechen in der halbklassischen Vorstellung — nach der statistischen Theorie des Atoms — Elektronen mit verschiedenen Impulsen. Nach dem Pauliprinzip des statistischen Atommodells kann sich nämlich in einer $\frac{h^3}{2}$ grossen Zelle des Phasenraumes nur ein einziges Elektron aufhalten. Greift man im Atom ein Volumenelement dv heraus, in dem das Potential bereits als konstant angesehen werden kann, in dem sich aber noch viele Teilchen befinden, so besetzen die Bildpunkte der sich in diesem Volumenelement befindlichen Teilchen im Impulsraum eine Kugel. Unter verschiedenen Quantenzuständen sind hier Punkte mit verschiedenen Impulsen der Impulskugel zu verstehen. Die radialen Komponenten dieser Impulse sind offenbar Analoga der durch die orthogonalen Einelektronwellenfunktionen definierten Impulse p_{ri}^0 . Der azimuthale Impuls eines Quantenzustandes ist sowohl bei dem orthogonalen wie auch bei dem von uns definierten nichtorthogonalen Wellenfunktionensystem gleich, da gemäss der Separation der Einelektronwellenfunktionen der von den Winkelkoordinaten abhängige Faktor in den beiden Wellenfunktionensystemen gleich ist. Zwischen den zweierlei Einelektronwellenfunktionen zeigt sich der Unterschied in der radialen Teil der Wellenfunktionen, so dass man von zweierlei radialen Impulsen sprechen kann. (Auf das Analogon des durch die nichtorthogonalen Einelektronwellenfunktionen definierten Impulses p_{ri} soll später zurückgekommen werden.) Führt man nun in den Ausdruck (4) halbklassische Bezeichnungen ein, so erhält man

$$E^W = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta v^{1/2}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{v^{1/2}(\mathbf{r}, \mathbf{p})} , \quad (4)$$

wo \mathbf{p} den Impuls des entsprechenden Quantenzustandes bedeutet. Die Einführung der Begriffe der statistischen Atomtheorie erscheint deshalb angezeigt, damit schon hier die Deutung der statistischen Atomtheorie für die einzelnen Glieder der erhaltenen Hamilton-Funktion gegeben werden könne.

Das zweite Glied des Hamiltonoperators der Gleichung (1) lautet:

$$E_i^{Kr} = \frac{1}{2m} (p_{ri}^{02} - p_{ri}^2) . \quad (6)$$

Hier ist laut der obigen Ausführungen $\frac{1}{2m} p_{ri}^{02}$ die radiale kinetische Energie

es im i -ten Quantenzustand befindlichen Elektrons. Um den Charakter des Gliedes $\frac{1}{2m} p_{ri}^2$ klären zu können, überlege man folgendes. Infolge des Pauli-Prinzips kann man sich den radialen Impuls eines Teilchens aus zwei Teilen zusammengesetzt denken. Infolge des Umstandes, dass sich in einer Phasenzelle vom Volumen $\frac{h^3}{2}$ nur ein einziges Teilchen aufhalten kann, können sich nicht sämtliche Teilchen im Quantenzustand mit der tiefsten Energie befinden, sondern die Teilchen werden ausgehend vom tiefsten Energiezustand sukzessive die Zustände mit höherer Energie besetzen. Es soll nun der maximale radiale Impuls jener Elektronen, die den gleichen azimuthalen Impuls aufweisen wie das in i -ten Quantenzustand befindliche Elektron (dies bedeutet, wie gezeigt werden soll, auch dieselbe Nebenquantenzahl), dabei aber tiefere Quantenzustände besetzen, mit $p_{\mu_{ri}}$ bezeichnet werden. Zusammen mit dem i -ten Elektron besetzen diese Elektronen bis zu einem radialen Impuls $p_{\mu_{ri+1}}$ die Phasenzelle mit dem entsprechenden azimuthalen Impuls. Die Differenz zwischen diesen beiden

$$p_{\mu_{ri+1}} - p_{\mu_{ri}} = p_0 \quad (7)$$

ist jene radiale Impulsbreite, die vom Elektron im i -ten Quantenzustand besetzt wird. Da in dem Volumenelement dv das Potential konstant ist, so ist im Impulsraum keine einzige Richtung ausgezeichnet; infolgedessen ist die Impulsbreite in jeder Richtung, so z. B. auch in azimuthaler Richtung gleich gross. Über die Impulsbreite in azimuthaler Richtung ist jedoch bekannt, dass

$$p_0 = \hbar \frac{1}{r}, \quad (8)$$

d. h. dass sie an einer gegebenen Stelle eine vom Quantenzustand des Elektrons unabhängige Grösse ist [7].

In erster Näherung kann angenommen werden, dass der Endpunkt des Impulses des im i -ten Quantenzustand befindlichen Elektrons in die Mitte des durch p_0 gegebenen Bereiches zu liegen kommt:

$$p_{ri}^0 = p_{\mu_{ri}} + \frac{1}{2} p_0. \quad (9)$$

Der Impuls $p_{\mu_{ri}}$ kann als die Folge davon aufgefasst werden, dass der radiale Anteil der Wellenfunktion des den i -ten Eielektronenzustand einnehmenden Elektrons orthogonal zu dem radialen Teil der Wellenfunktionen jener Elektronen ist, die tiefere Quantenzustände mit dem gleichen azimuthalen Impuls besetzen. Es ist offenbar, dass die radiale kinetische Energie des den i -ten

Quantenzustand besetzenden Elektrons, wenn man von dieser Orthogonalität absieht, im Minimum

$$\frac{1}{2m} (p_{ri}^{02} - p_{\mu ri}^2) = \frac{1}{2m} \left[p_{ri}^{02} - \left(p_{ri}^0 - \frac{1}{2} p_0 \right)^2 \right] \quad (1)$$

sein wird, wobei man diesen Ausdruck zweckmässig als die radiale kinetische Selbstenergie dieses Elektrons bezeichnen kann [8]. Gemäss I. Gl. (68') wurde dagegen die nichtorthogonalen Einelektronwellenfunktionen ψ_i gerade so bestimmt, dass die radiale kinetische Energie der einzelnen Elektronen ein Minimum sei. Das in I. Gl. (65) definierte Glied $\frac{1}{2m} p_{ri}^2$ ist die radiale kinetische Selbstenergie des im i -ten Quantenzustand befindlichen Elektrons:

$$\frac{1}{2m} p_{ri}^2 = \frac{1}{2m} \left[p_{ri}^{02} - \left(p_{ri}^0 - \frac{1}{2} p_0 \right)^2 \right] \quad (1a)$$

und infolgedessen wird die Gleichung (6) folgende Form annehmen:

$$E_i^{Kr} = \frac{1}{2m} \left(p_{ri}^0 - \frac{1}{2} p_0 \right)^2. \quad (1b)$$

Der auf den Quantenzustand hinweisende Index kann weggelassen werden, der Quantenzustand bei halbklassischer Betrachtung durch den Impuls bezeichnet wird, dessen radiale Komponente p_r^0 ist:

$$E^{Kr} = \frac{1}{2m} \left(p_r^0 - \frac{1}{2} p_0 \right)^2. \quad (1c)$$

Der radiale Impuls $p_{\mu ri}$ lässt sich durch die Dichte der tieferen Zustände an den i -ten besetzenden, die gleiche Nebenquantenzahl wie das i -te Elektron aufweisenden Elektronen ausdrücken [9]:

$$p_{\mu ri} = \frac{h\pi}{2l_i + 1} r^2 \varrho_i(r). \quad (1d)$$

Wenn man die Bedingung aufstellt, dass zu den Wellenfunktionen φ_i mit niedrigerem Index ein Quantenzustand mit tieferer Energie zu gehören habe, lässt sich $\varrho_i(r)$ folgendermassen schreiben:

$$\varrho_i(r) = \sum_{k=1}^{i-1} \varphi_k^*(r) \varphi_k(r) \delta_{l_i l_k}. \quad (1e)$$

Hier wurde der Umstand verwendet, dass man $\varphi_i^*(r) \varphi_i(r)$ als Dichte eines den i -ten Quantenzustand besetzenden Elektrons ansehen kann. Infolgedessen

ergibt sich aus den Beziehungen (6), (9), (11), (13) und (13')

$$E_i^{Kr} = \frac{1}{2m} (p_{ri}^{02} - p_{ri}^2) = \frac{h^2 \pi^2}{2m(2l_i + 1)^2} r^4 \left(\sum_{k=1}^{i-1} \varphi_k^*(r) \varphi_k(r) \delta_{l_i l_k} \right)^2. \quad (14)$$

Setzt man diesen Ausdruck in die I. Gl. (69') ein, so gelangt man — worauf schon in I. hingewiesen wurde — tatsächlich zu einem Gleichungssystem, in dem die orthogonalen Einelektronwellenfunktionen ψ_k^0 bereits nicht mehr vorkommen, so dass aus diesen Gleichungen die Wellenfunktionen ψ_i nunmehr auch tatsächlich bestimmt werden können.

Es ist zu betonen, dass bei der Anschreibung der Gleichungen (4), (12) und (14) die Bedingung I. Gl. (68') eine sehr wesentliche Rolle spielte, da sie von den möglichen nichtorthogonalen Wellenfunktionensystemen dasjenige aussucht, bei dem die radiale kinetische Energie der einzelnen Elektronen ein Minimum ist.

Das Energieglied

$$E_i^{Ka} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} = \frac{1}{2m} p_{ai}^2 \quad (15)$$

ist die azimutale kinetische Energie des im i -ten Quantenzustand befindlichen Elektrons, wo p_{ai} den azimutalen Impuls dieses Elektrons bezeichnet. (Auf Grund der vorstehenden Darlegungen ist $p_{ai}^0 = p_{ai}$.) Es ist ersichtlich — worauf schon früher hingedeutet wurde —, dass die azimutalen Impulse der Einelektronenzustände mit gleicher Nebenquantenzahl miteinander übereinstimmen. Da p_a als die azimutale Komponente des Impulses p auch hier auf den Quantenzustand hinweist, kann der Index i weggelassen werden:

$$E^{Ka} = \frac{1}{2m} p_a^2. \quad (16)$$

Bei Benutzung der Ausdrücke (12) und (16) der kinetischen Energie kann man zu einem statistischen Atommodell gelangen, in dem die Elektronen nach ihrer Nebenquantenzahl gruppiert sind. Falls man eine solche Gruppierung der Elektronen vermeiden will, kann man folgende Approximation anwenden. Da in einem Volumenelement dv , das an einem gegebenen Ort angenommen wurde, das Potential als konstant betrachtet werden kann, werden die Bildpunkte der in diesem Volumenelement befindlichen Teilchen im Impulsraum eine Kugel besetzen, die in keiner Richtung ausgezeichnet ist. Es kann im Durchschnitt die radiale kinetische Energie der Teilchen der Hälfte der azimutalen kinetischen Energie gleichgesetzt werden (die azimutale kinetische Energie bedeutet nämlich die Summe von zwei kinetischen Energien, die zu

zwei aufeinander senkrecht stehenden Impulskomponenten gehören). Infolgedessen gestalten sich die Gleichungen (12) und (16) wie folgt :

$$E^{Kr} = \frac{1}{2m} \left(p_r^0 - \frac{1}{2} p_0 \right)^2 = \frac{1}{3} \frac{1}{2m} \left(p - \frac{1}{2} p_0 \right)^2 \quad (12)$$

und

$$E^{Ka} = \frac{1}{2m} p_a^2 = \frac{2}{3} \frac{1}{2m} p^2, \quad (16)$$

wo p den Betrag des Impulses \mathfrak{p} bezeichnet. Bei der Aufstellung der Gleichung (12') wurde der Umstand benutzt, dass p_0 in jeder Richtung gleich ist, dass also $p_r^0 - \frac{1}{2} p_0$ die radiale Komponente des Impulses $\mathfrak{p} - \frac{1}{2} \mathfrak{p}_0$ ist.

Die von dem Kern resultierende potentielle Energie

$$E^{Pk} = - \frac{Ze^2}{r} \quad (17)$$

und die von den Elektronen herrührende potentielle Energie

$$E^{Pe} = e^2 \int \frac{\varrho(r)}{|r-r'|} dv' \quad (18)$$

lassen sich nach der klassischen Anschauung unmittelbar deuten. Die von den Elektronen herrührende potentielle Energie erhält man aus der Form I. Gl. (17) von U^0 , wenn man über die Spinvariable integriert.

Dem Operator A^0 — der die Austauschwechselwirkung zwischen einem Elektron und sämtlichen Elektronen des Atoms bezeichnet — entspricht in halbklassischer Näherung der folgende Ausdruck :

$$E^a = - \frac{e^2}{h} \left(\frac{p_\mu^2 - p^2}{p} \ln \frac{p_\mu + p}{p_\mu - p} + 2p_\mu \right), \quad (19)$$

wo p_μ den maximalen Impuls der im Volumenelement dv befindlichen Elektronen bedeutet [10].

So lautet die gesuchte Hamiltonsche Funktion, die der Energie des Elektrons mit dem Impuls \mathfrak{p} gleich ist, auf Grund der Beziehungen (4'), (12'), (16'), (17), (18) und (19)

$$H = E = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta v^{1/2}(r, \mathfrak{p})}{v^{1/2}(r, \mathfrak{p})} + \frac{1}{6m} \left(p - \frac{1}{2} p_0 \right)^2 + \frac{1}{3m} p^2 - \frac{Ze^2}{r} + \quad (20)$$

$$+ e^2 \int \frac{\varrho(r')}{|r-r'|} dv' - \frac{e^2}{h} \left(\frac{p_\mu^2 - p^2}{p} \ln \frac{p_\mu + p}{p_\mu - p} + 2p_\mu \right).$$

3. Man erhält die vollständige Energie des Atoms, wenn man bei Annahme von vielen Teilchen die Gleichung (20) über die Zahl der Teilchen integriert :

$$\epsilon = \int_0^n E dn = \epsilon_w + \epsilon_k^f + \epsilon_k^a + \epsilon_p^k + \epsilon_p^e + \epsilon_a, \quad (21)$$

wo die einzelnen Energieglieder der Reihe nach das Integral über die Teilchenzahl der einzelnen Glieder des Ausdruckes (20) bedeuten. Die Integration nach der Teilchenzahl lässt sich mit Hilfe der WENTZEL-KRAMERS-BRILLOUIN-chen (WKB-) Näherungsmethode [11] ausführen. Diese Methode führt zu dem gleichen Ergebnis, wie wenn man die Integration nach der Teilchenzahl auf Grund der statistischen Atomtheorie auf eine Integration im Phasenraum zurückführte (diese Tatsache ist eigentlich als eine Begründung des letzteren Verfahrens zu betrachten). Da die einzelnen Glieder des Energieausdruckes (20) bereits nach der statistischen Atomtheorie gedeutet wurden, ist es der Übersichtlichkeit halber zweckmässig, die Integration mit deren Hilfe auszuführen.

Laut der statistischen Atomtheorie [12] ist

$$dn = f dQ \quad (22)$$

und

$$dQ = \frac{2}{h^3} dv d\Theta, \quad (22')$$

wo $d\Theta$ das Volumenelement des Impulsraumes ist.

Hier ist f die Verteilungsfunktion, die im Falle eines völlig entarteten Elektronengases (hier soll nur dieser Fall erörtert werden)

$$f = 1, \text{ wenn } p \leq p_\mu \text{ und } f = 0, \text{ wenn } p > p_\mu.$$

Hier ist p_μ der maximale Impuls der Elektronen in einem Volumenelement dv . Dieser Impuls hängt mit der in diesem Volumenelement herrschenden Dichte folgendermassen zusammen :

$$p_\mu = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} h \varrho^{1/3}. \quad (23)$$

Es seien nun die einzelnen Glieder des Energieausdruckes (21) näher untersucht. Auf Grund der Beziehungen (22) und (22') ergibt sich

$$\epsilon_w = - \frac{\hbar^2}{2m} \int dv \int_{p \leq p_\mu} \frac{\Delta_r v^{1/2}(r, p)}{v^{1/2}(r, p)} \frac{2}{h^3} d\Theta. \quad (24)$$

Um dieses Integral berechnen zu können, sei $v(r, p)$ durch den Mittelwert der verschiedenen Quantenzustände substituiert :

$$\bar{v} = \frac{1}{n} \int_{p \leq p_\mu(r)} dv' \int v(r, p) \frac{2}{h^3} d\Theta. \quad (25)$$

Geht man in der Beziehung (5') von der Summierung über die Quantenzustände auf die Integration im Impulsraum über, so erhält man :

$$\varrho(r) = \int_{p \leq p_d(r')} dv' \int v(r, p) \frac{2}{h^3} d\Theta . \quad (2)$$

Auf diese Weise ist

$$\bar{v} = \frac{\varrho(r)}{n} . \quad (2)$$

Setzt man diesen Durchschnittswert in die Gleichung (24) ein, so ergibt sich unter Berücksichtigung des Ausdrucks (23)

$$\epsilon_W = - \frac{\hbar^2}{2m} \int \varrho^{1/2}(r) \Delta_r \varrho^{1/2}(r) dv , \quad (2)$$

oder durch partielle Integration

$$\epsilon_W = \frac{\hbar^2}{8m} \int \frac{[\text{grad } \varrho(r)]^2}{\varrho(r)} dv . \quad (2)$$

Bei der partiellen Integration wurde der Umstand ausgenutzt, dass im Falle dieser statistischen Atomtheorie das Glied

$$r^2 \frac{d\varrho(r)}{dr}$$

beim Atomkern und im Unendlichen verschwindet.

Es ist ersichtlich, dass ϵ_W eben jene Energie ist, die man als die WEISSÄCKERSCHE Inhomogenitätskorrektur zu bezeichnen pflegt [13].

Die übrigen Integrale des Energieausdruckes (21) lassen sich ohne weiteres lösen und führen zu dem folgenden Ergebnis :

$$\epsilon_k^r = \frac{2}{3} \int_{p_{\mu} \leq \frac{1}{2} p_0} \left(\kappa_0 \varrho^{5/3} - \kappa_1 \varrho^{4/3} \frac{1}{r} + \kappa_2 \varrho \frac{1}{r^2} - \kappa_3 \frac{1}{r^5} \right) dv , \quad (2)$$

$$\epsilon_k^a = \frac{4}{3} \kappa_0 \int \varrho^{5/3} dv , \quad (3)$$

$$\epsilon_p^k = - \int \frac{Ze^2}{r} \varrho dv , \quad (3)$$

$$\epsilon_p^a = \frac{1}{2} e^2 \iint \frac{\varrho(r) \varrho(r')}{|r - r'|} dv dv' , \quad (3)$$

$$\epsilon_a = - \kappa_a \int \varrho^{4/3} dv , \quad (3)$$

$$\begin{aligned}
 \kappa_0 &= \frac{3}{80} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{2/3} \frac{h^2}{m}, & \kappa_1 &= \frac{3}{64\pi} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \frac{h^2}{m}, \\
 \kappa_2 &= \frac{1}{64\pi^2} \frac{h^2}{m}, & \kappa_3 &= \frac{1}{15360\pi^4} \frac{h^2}{m}, \\
 \kappa_a &= \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} e^2.
 \end{aligned} \tag{34}$$

Bei der radialen kinetischen Energie ist die Integration nur auf jene Zone des Raumes auszudehnen wo $p_\mu \geq \frac{1}{2} p_0$. Der Grund hierfür ist, dass im Impulsraum nicht von $p = 0$, sondern von $p = \frac{1}{2} p_0$ bis $p = p_\mu$ integriert wurde, weil im Falle von $p < \frac{1}{2} p_0$ der Impuls $p - \frac{1}{2} p_0$ negativ sein wird, was keinen Sinn hat.

Der hier gewonnene Energieausdruck stimmt völlig mit dem von GOMBÁS erhaltenen Energieausdruck überein [14]. Auf Grund unseres Ergebnisses kann also die kinetische Energie des FERMISCHEN Gases nicht als die Summe der FERMISCHEN kinetischen Nullpunktsenergie und der WEIZSÄCKERSCHEN Inhomogenitätskorrektur angesprochen werden, da ja auf diese Weise der radiale Anteil der kinetischen Selbstenergie der einzelnen Elektronen zweimal berücksichtigt wurde. Zum richtigen Ergebnis wird man dann gelangen, wenn man laut der Gleichung (29) den radialen Anteil der FERMISCHEN kinetischen Nullpunktsenergie subtrahiert. Es sei hier bemerkt, dass bei gleichzeitiger Weglassung sowohl der WEIZSÄCKERSCHEN Korrektur als auch der Subtraktion dieser radialen kinetischen Selbstenergie [was dasselbe ist, als wenn man das Energieglied (4) in halbklassischer Näherung schriebe $\frac{1}{2m} p_{ri}^2$, d. h. die Tatsache nicht berücksichtigte, dass die Koordinate und die kanonisch konjugierte Impulskomponente nicht vertauschbar sind] der Energieausdruck (21) mit dem THOMAS-FERMI-DIRACschen Energieausdruck übergeht [15].

Die Dichte $\varrho(r)$ ist so zu bestimmen, dass ausser der Nebenbedingung:

$$\int \varrho dv = n \tag{35}$$

die durch die Gleichung (21) ausgedrückte Energie ein Minimum zu sein hat:

$$\delta(\epsilon + V_0 n e) = 0, \tag{36}$$

wo V_0 der Lagrangesche Multiplikator ist.

Berechnet man die Elektronendichte aus der so gewonnenen Gleichung (20), so wird sie sowohl in der Nähe des Kernes als auch in grosser Entfernung vom Kern so schnell abnehmen, dass man sie gut annähern kann. (Sie bleibt am Ort des Kernes endlich und verschwindet exponentiell im Unendlichen.) Die auf Grund des Ausdrucks (21) der Elektronen ermittelte Energie liefert einen Wert, der bei gewissen Korrekturen, die bei kleinen Elektronenzahlen wesentlich sind, hier aber nicht ausführlich besprochen werden sollen, innerhalb einer Fehlergrenze von 3% der empirisch bzw. wellenmechanisch ermittelten Werte liegt [16].

4. Es wurde also nachgewiesen, dass sich das halbklassische Analogon des Hamiltonoperators (1) ansetzen und daraus der halbklassische Energieausdruck des Atoms herleiten lässt. Bei der Aufstellung des halbklassischen Analogons war die halbklassische Näherung in dem Sinne, dass man die Tatsache der Unvertauschbarkeit von Koordinaten und kanonisch konjugierten Impulskomponenten unberücksichtigt lässt, nur bei zwei Gliedern notwendig. Das eine solche Glied ist die um die radiale kinetische Selbstenergie verminderte radiale kinetische Energie $\frac{1}{2m}(p_{ri}^{02} - p_{ri}^2)$, das andere das dem Austauschoperator A^0 entsprechende Energieglied E^2 . Der beim ersten Glied begangene Fehler ist klein, da im ersten Glied zwei Energieglieder von ähnlicher Beschaffenheit vorkommen, bei denen der beim Übergang zur halbklassischen Näherung begangene Fehler ungefähr gleich gross ist. Da die Differenz dieser beiden Glieder zu bilden ist, ist der Gesamtfehler im Endergebnis recht geringfügig. Die Energie E^2 bedeutet in der Energie des Atoms nur eine kleine Korrektur, so dass der bei seiner Berechnung begangene Fehler die Energie des Atoms kaum beeinflusst. Auf Grund dieser Erklärungen ist es verständlich, warum die auf diese Weise berechnete Energie und Elektronendichte des Atoms so gut mit den empirisch bzw. wellenmechanisch ermittelten Werten übereinstimmt. Wie bereits erwähnt stehen die so erhaltenen halbklassischen Gleichungen von GOMBÁS früher — durch Modifikation der WEIZSÄCKERSCHEN Korrektur — gewonnenen Gleichungen im Einklang. Es war also mit Hilfe der von der Wellenmechanik benutzten Methode des »self-consistent field« möglich, die Inhomogenitätskorrektur der statistischen Theorie des Atoms herzuleiten. Da die Begründung der statistischen Theorie des Atoms mit Hilfe der Methode des »self-consistent field« der Wellenmechanik möglich ist, lässt sich die so erhaltene Inhomogenitätskorrektur organisch in die statistische Theorie des Atoms ein und bedeutet somit eine wesentliche Verbesserung dieser Theorie [17].

Zum Abschluss sei noch darauf hingewiesen, dass die vorliegenden Überlegungen, obwohl sie sich auf die Elektronenhülle des Atoms beziehen, sinnmässig auch auf den Atomkern übertragen werden können. Die Ursache, warum sich keine Notwendigkeit dieser Modifikation der kinetischen Energie in

statistischen Theorie des Atomkernes bei Berücksichtigung der WEIZSÄCKER-chen Inhomogenitätskorrektur zeigte, dürfte darin bestehen, dass die Wechselwirkungskräfte zwischen den Nukleonen noch nicht genau bekannt sind, so dass die Darlegung der statistischen Theorie des Atomkernes nur unter der Annahme von mehr oder minder willkürlichen Wechselwirkungstypen möglich ist. Die in dem Ausdruck dieser Wechselwirkungen vorkommenden Parameter wählt man hierbei so zu wählen, dass die theoretischen Ergebnisse, z. B. die Kernenergien, mit den empirischen Angaben übereinstimmen.

Es sei Herrn Professor Dr. P. GOMBÁS auch an dieser Stelle für seine wertvollen Ratschläge bestens gedankt.

LITERATUR

1. P. A. M. DIRAC, Proc. Camb. Phil. Soc., **26**, 376, 1930.
2. C. F. v. WEIZSÄCKER, Zs. f. Phys., **96**, 431, 1935.
3. Siehe z. B. P. GOMBÁS, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer, Wien, 1949, S. 116.
4. P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **3**, 105, 1953.
5. P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **3**, 127, 1953 und P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **5**, 483, 1956.
6. P. SZÉPFALUSY, Acta Phys. Hung., **6**, 273, 1956.
7. Siehe z. B. P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **3**, 127, 1953. Diesbezüglich siehe noch: P. GOMBÁS und P. SZÉPFALUSY, Acta Phys. Hung., **5**, 259, 1955.
8. Diese Benennung stammt von GOMBÁS. Siehe diesbezüglich: P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **3**, 105, 1953.
9. P. GOMBÁS: Acta Phys. Hung., **1**, 285, 1952.
10. Siehe z. B. **3**, S. 24.
11. L. BRILLOUIN, L'atome de Thomas-Fermi (Actualités sci. industr., No. 160.) Herman, Paris, 1934.
I. FÉNYES, Zs. f. Phys., **125**, 336, 1948.
N. H. MARCH-J. S. PLASKETT, Proc. Roy Soc., A, **235**, 419, 1956.
12. Siehe z. B. **3**, S. 5 und 6.
13. Siehe 2.
14. P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **3**, 127, 1953. In dieser Arbeit steht vor der radialen kinetischen Energie (20) und der azimuthalen kinetischen Energie (19) nicht der Faktor $2/3$ bzw. $3/4$, da GOMBÁS die radiale und azimuthale kinetische Energie in dieser seiner Arbeit nicht im Verhältnis 1 : 2, sondern 1 : 1 in Betracht zog. GOMBÁS änderte dies in einer späteren Arbeit ab: P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **5**, 483, 1956.
15. Siehe z. B. **3**, S. 78.
16. P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **3**, 127, 1953 und P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **5**, 483, 1956.
17. Der Zusammenhang zwischen dem um die WEIZSÄCKERSche Korrektur erweiterten Energieausdruck der statistischen Atomtheorie und der HARTREE-FOCKschen Methode wurde mit Hilfe eines verallgemeinerten RITZschen Verfahrens von W. MASKE, Phys. Rev., **100**, 992, 1955; Ann. d. Phys. **17/6**, 1, 1955 nachgewiesen.

КОРРЕКЦИИ НЕОДНОРОДНОСТИ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ФЕРМИ ПОЛУСПИНОВЫХ ЧАСТИЦ

П. СЕПФАЛУШИ

Резюме

Автор поставил себе целью показать, что на основе метода Хартри-Фока по волновой механике можно выводить выражение энергии статистической атомной теории, расширенное коррекцией Вейцзеккера и видоизмененное Гомбашем.



CALCULATION OF THE ELECTRON AFFINITY OF ALKALI ATOMS AND OF THE IONIZATION ENERGY OF THE Ca ATOM

By

L. SZÁSZ

PHYSICAL INSTITUTE, UNIVERSITY FOR TECHNICAL SCIENCES, BUDAPEST

(Presented by P. Gombás. — Received 2. IV. 1956)

GOMBÁS's method taking into account the interaction between the atomic core and the valency electrons is applied to the solution of the two-electron problem. As is known the method essentially consists in replacing the postulate that the eigenfunction of the valency electron should be orthogonal to that of the core electrons by a repulsive potential. Using for the potential HELLMANN's semi-empirical expression the electron affinity of alkali atoms and the ionization energy of the Ca atom have been calculated. The eigenfunction of the two-electron problem has been assumed in a form including the correlation between the electrons, which corresponds to HYLLEBERG's second approximation; the third approximation has been estimated. The calculations show that GOMBÁS's method can take account of the stability of negative alkali ions.

I. Introduction

In metallic and molecular bond problems it is of fundamental importance to take proper account of the interaction between the atomic core and the valency electrons. Except for the problem of the simplest molecule, H_2 , all such problems are encountered with this difficulty. Evidently, it is impossible to take explicitly into account all the core electrons if cores with many electrons are considered; this is not necessary though, as it is well known that the interaction between the atomic core and the valency electrons can to good approximation be assumed in the form of an effective potential. Thus, for the case of z valency electrons the problem is thought of as a z -electron problem and is solved by solving the Schrödinger equation for z valency electrons in the field of this potential.

The formulation of the problem, however, is still possible in two ways. In wave-mechanical calculations we have to postulate that the eigenfunction of the valency electrons should be orthogonal to that of the core electrons. This, however, renders it very difficult to set up the eigenfunction in analytical form, i. e. to apply the variational method, and thus the calculation of the solution involves great difficulties. GOMBÁS [1] pointed out that the problem can be solved in a different way: the postulate based on Pauli's principle that the one-electron eigenfunction of the valency electrons should be orthogonal to that of the core electrons, can be taken into account in the form of a repulsive potential. In this case the eigenfunction of the valency electrons, as was shown

by GOMBÁS, can be written in very simple analytical form and the problem can be solved by variational calculation. The interaction between the valency electron and the atomic core was assumed by GOMBÁS in the form

$$U = V + F,$$

where V and F denote the electrostatic and the repulsive potential, respectively. The problem can therefore be solved as if the core electrons did not exist. Our purpose is now to find the energetically lowest state of the valency electron in the field of potential (1).

The explicit form of the modified potential (1) was derived by GOMBÁS on the basis of the statistical theory of the atom. For the s -states of the valency electrons a very simple semi-empirical analytical form of the potential was given by HELLMANN [2]. The purpose of the present paper is to apply the HELLMANN potential to the solution of the two-electron problem. In sections II—IV we shall determine the energy eigenvalue of the ground state of the negative alkali ions and of the Ca atom. In section V we shall compare the results obtained here with the experimental values and the calculated values of other authors.

II. Determination of the constants of Hellmann's potential for the Li atom

As we have noted above the modified potential was developed by GOMBÁS on the basis of the statistical theory of the atom. He obtained for an atom consisting of an atomic core of many electrons and closed shells and of z valency electrons that the repulsive potential acting on the i -th valency electron is given by

$$F_i = -\gamma_0 (\varrho^{2/3} - \varrho_i^{2/3}),$$

where ϱ is the electron density of the whole atomic core and ϱ_i denotes the electron density of the core electrons, the energy of which is lower than the lowest possible energy of the selected valency electron; $\gamma_0 = \frac{1}{2} (3\pi^2)^{2/3}$.

Thus, for the alkali atoms, their negative ions and for the Ca atom in the ground state $\varrho_i = 0$.

According to HELLMANN's investigations the analytical form of potential (1) becomes, if the valency electron is in the s -state

$$U = \frac{z}{r} - A \frac{e^{-2\kappa r}}{r}.$$

Here $\frac{z}{r}$ is the coulomb-like potential of the atomic core. HELLMANN approx-

¹ In the present paper atomic units are used everywhere.

ated the non-coulomb-like electrostatic potential of the atomic core and the repulsive potential by an analytical expression. The constants A and κ were determined by demanding that the lowest calculated s -term of the valency electron should agree with the experimental value and that the first excited term and the lowest p -term should approximate the experimental value as closely as possible. The constants determined in this way by HELLMANN for the Na, K, Rb, Cs atoms and Mg^+ and Ca^+ ions are listed in Table I, where the calculated and experimental values of the lowest and first excited term of the valency electron are also included.

The calculation is now to be extended to the Li atom. According to HELLMANN we proceed by assuming the non-normalized eigenfunction of the valency electron in the ground state in the form

$$\psi(2s) = e^{-\varepsilon r} \quad (4a)$$

and in the first excited state in the form

$$\psi(3s) = \left(1 - \frac{\varepsilon + \eta}{3} r\right) e^{-\eta r}, \quad (4b)$$

where the condition that the eigenfunction of the excited s -state should be orthogonal to that of the ground state has been satisfied. In determining A and κ we must take into account that, as is known from GOMBÁS'S work, the repulsive potential varies from state to state, according to the various azimuthal quantum numbers of the valency electron. Therefore, in some contrast to HELLMANN'S method, we demand that besides the ground s -term the first excited s -term should also agree with experiment. Thus we obtain the modified potential for the s -states of the valency electron. Substituting the eigenfunctions (4) into the Schrödinger equation the eigenvalues are obtained as functions of the parameters ε , η , A and κ :

$$E(2s) = \frac{1}{2} \varepsilon^2 - z\varepsilon + A\varepsilon \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon + \kappa} \right)^2, \quad (5a)$$

$$\begin{aligned} E(3s) = & \eta^2 \left(\frac{1}{6} + \frac{1}{1 - \frac{\varepsilon}{\eta} + \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^2} \right) - \frac{z\eta}{2} \left(1 + \frac{2 - \frac{\varepsilon}{\eta}}{1 - \frac{\varepsilon}{\eta} + \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^2} \right) \\ & 3 - 2 \frac{1 + \frac{\varepsilon}{\eta}}{1 + \frac{\kappa}{\eta}} + \frac{1}{2} \left(\frac{1 + \frac{\varepsilon}{\eta}}{1 + \frac{\kappa}{\eta}} \right)^2 \\ & + A\eta \frac{1}{\left(1 + \frac{\kappa}{\eta}\right)^2 \left(1 - \frac{\varepsilon}{\eta} + \left(\frac{\varepsilon}{\eta}\right)^2\right)}. \end{aligned} \quad (5b)$$

In addition to these the following equations must be satisfied :

$$\frac{\partial E(2s)}{\partial \varepsilon} = 0, \quad \frac{\partial E(3s)}{\partial \eta} = 0. \quad (5)$$

Using the experimental values of the eigenvalues $E(2s)$ and $E(3s)$ [3] the parameters ε , η , A and \varkappa must be chosen to satisfy the above four equations. The parameters of the potential and of the eigenfunctions are uniquely determined. The parameter values determined in this manner for the Li atom are given in Table I.

It should be noted that the method used here for the determination of the constants shows that the modified potential also involves the exchange and correlation interaction between the valency electron and the atomic core. Obviously, however, the representation of these interactions by a potential can only be regarded as a rough approximation.

Table I

Parameters of the HELLMANN potential for the alkali atoms and the Mg^+ and Ca^+ ions as well as energies of the lowest and first excited s -state of the valency electron. The energies are given in eV, \varkappa in $\frac{1}{a_0}$ units.

Atom Ion	A	\varkappa	Ground s term experimental	Excited s term experimental	Excited s term calculated
Li	1,287	0,422	5,390	2,02	2,02
Na	1,826	0,536	5,140	1,95	1,85
K	1,989	0,449	4,339	1,73	1,63
Rb	1,640	0,358	4,160	1,68	1,69
Cs	1,672	0,333	3,890	1,595	1,53
Mg^+	4,656	0,844	15,03	6,38	5,75
Ca^+	3,653	0,506	11,87	5,40	4,91

III. Calculation of the ionization energy of negative alkali ions and of the Ca atom in first and second approximation

We now proceed to determine the eigenvalues mentioned above. Having assumed the interaction between the valency electrons and the core in the form of a HELLMANN potential, the Hamiltonian of the two-electron problem is

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}(A_1 + A_2) - \frac{z}{r_1} - \frac{z}{r_2} + A \frac{e^{-2\kappa r_1}}{r_1} + A \frac{e^{-2\kappa r_2}}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (6)$$

where r_1 and r_2 denote the distances of the two electrons from the nucleus; r_{12} is the distance between the electrons and Δ_i is the Laplace operator acting on the i -th electron. z is defined in connection with equation (3). Thus for negative ions $z = 1$, for the Ca atom $z = 2$.

The problem is solved by variational calculation. The Schrödinger energy expression, the minimum of which is sought for, is

$$E = \frac{\int \Psi^* \mathbf{H} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \quad (7)$$

Here Ψ means the eigenfunction of the two electrons chosen in suitable form so as to contain adjustable parameters, which can be determined from the principle of minimum energy.

In the first approximation the eigenfunction of the two electrons is assumed as a simple product of the one-electron eigenfunctions

$$\Psi_1 = \psi(r_1)\psi(r_2) = e^{-\gamma r_1 - \gamma r_2}, \quad (8)$$

where the parameter γ is to be determined from the principle of minimum energy. A short calculation shows that

$$E = -2z\gamma + \gamma^2 + \frac{5}{8}\gamma + 2A\gamma \left(\frac{\gamma}{z + \gamma} \right)^2. \quad (9)$$

The eigenvalues obtained by minimizing expression (9) are listed in Table II. Except for the K^- ion the negative ions turn out to be unstable in the first approximation and the decrease of the eigenvalue of the K^- ion as compared to the eigenvalue of the K atom is so slight that this ion can also be regarded as unstable. Thus, in the first approximation all negative ions are unstable.

Thus, the eigenfunction must be extended. According to HYLLERAAS's method [4], in a manner similar to the one adopted by GOMBÁS [5], we introduce into the eigenfunction the distance between the electrons. The new eigenfunction is

$$\Psi_2 = \psi(r_1)\psi(r_2) [1 + cr_{12}] = e^{-\gamma r_1 - \gamma r_2} [1 + cr_{12}], \quad (10)$$

where the parameters γ and c must be determined from the principle of minimum energy. By introducing c we take into account the fact that the electrons do not move independently of each other. Forming the Schrödinger energy expression with the aid of the new eigenfunction we obtain

$$E = \frac{c^2 I_1 + c I_2 + I_3}{c^2 I_4 + c I_5 + I_6}, \quad (11)$$

where

$$\left. \begin{aligned} I_1 &= \int r_{12} \psi(r_1) \psi(r_2) \mathbf{H} \psi(r_1) \psi(r_2) r_{12} dv_1 dv_2, \\ I_2 &= \int r_{12} \psi(r_1) \psi(r_2) \mathbf{H} \psi(r_1) \psi(r_2) dv_1 dv_2 \\ &\quad + \int \psi(r_1) \psi(r_2) \mathbf{H} \psi(r_1) \psi(r_2) r_{12} dv_1 dv_2, \\ I_3 &= \int \psi(r_1) \psi(r_2) \mathbf{H} \psi(r_1) \psi(r_2) dv_1 dv_2, \\ I_4 &= \int r_{12}^2 \psi^2(r_1) \psi^2(r_2) dv_1 dv_2, \\ I_5 &= 2 \int r_{12} \psi^2(r_1) \psi^2(r_2) dv_1 dv_2, \\ I_6 &= \int \psi^2(r_1) \psi^2(r_2) dv_1 dv_2. \end{aligned} \right\} \quad (12a)$$

Simple calculation gives the integrals as functions of γ :

$$\left. \begin{aligned} I_1 &= \left\{ -9z + 2,1875 \left\{ \gamma + 4\gamma^2 + 3A\gamma \left[\left(\frac{\gamma}{\gamma + \kappa} \right)^4 + 2 \left(\frac{\gamma}{\gamma + \kappa} \right)^2 \right] \right\} \right\}, \\ I_2 &= \left\{ -\frac{15}{2} z + 2 \left\{ \gamma^2 + 3,125\gamma^3 + 4A\gamma^2 \left[\left(\frac{\gamma}{\gamma + \kappa} \right)^3 + \frac{\gamma}{2} \left(\frac{\gamma}{\gamma + \kappa} \right) \frac{7\gamma + 3\kappa}{(\kappa + 2\gamma)^2} \right] \right\} \right\}, \\ I_3 &= \left\{ -2z + \frac{5}{8} \left\{ \gamma^3 + \gamma^4 + 2A\gamma^3 \left(\frac{\gamma}{\kappa + \gamma} \right)^2 \right\} \right\}, \\ I_4 &= 6, \\ I_5 &= 4,375 \gamma, \\ I_6 &= \gamma^2. \end{aligned} \right\} \quad (12b)$$

The integrals (12b) have been multiplied by $\frac{\gamma^8}{\pi^2}$. In the course of the calculations for the negative ions and the Ca atom the respective values $z = 1$ and $z = 2$ must be substituted. The energy minimum can be found by the variation of parameters γ and c . The calculations are simplified by the fact that the variation with respect to c can be carried out in analytical way, since from the equation $\frac{\partial E}{\partial c} = 0$ we obtain that

$$c = \frac{-(I_1 I_6 - I_3 I_4) \pm \left\{ (I_1 I_6 - I_3 I_4)^2 - (I_1 I_5 - I_2 I_4) (I_2 I_6 - I_3 I_5) \right\}^{1/2}}{I_1 I_5 - I_2 I_4}. \quad (13)$$

The energy eigenvalues and the corresponding parameter values obtained by the variation are given in Table II. As can be seen all negative ions turn out to be stable and the energy decrease in comparison to the eigenvalue of the neutral atom is considerable.

Table II

energy eigenvalues and electron affinity values in the first and second approximation. Values of the parameters in the eigenfunction of the second approximation. For the Ca atom ϵ means the first ionization potential. The energies are expressed in eV, γ and c in $\frac{1}{a_0}$ units.

Ion Atom	E 1. approximation	ϵ 1. approximation	E 2. approximation	ϵ 2. approximation	γ	c
Li ⁻	— 5,242	— 0,148	— 5,821	0,431	0,355	2,065
Na ⁻	— 5,138	— 0,002	— 5,671	0,531	0,3365	2,51
K ⁻	— 4,347	+ 0,008	— 4,829	0,490	0,288	— 16,4
Rb ⁻	— 4,100	— 0,060	— 4,589	0,429	0,280	— 4,66
Cs ⁻	— 3,843	— 0,047	— 4,314	0,424	0,264	— 2,45
Ca	— 17,17	+ 5,30	— 17,63	5,76	0,452	1,13

IV. Estimation of the third approximation

As is well known the exact solution of the two-electron problem was brought for by HYLLERAAS by modifying the eigenfunction (10) in the following manner

$$\Psi_3 = \psi(r_1) \psi(r_2) [1 + c_1 r_{12} + c_2 (r_2 - r_1)^2], \quad (14)$$

where the energy minimum is now to be found by varying 3 parameters. The energy eigenvalue obtained by HYLLERAAS with the help of this eigenfunction closely approximates the experimental energy value. In the following we shall attempt to estimate the change brought about in the energy value by the transition from the second to the third approximation. First of all let us consider the eigenfunction

$$\Psi'_3 = \psi(r_1) \psi(r_2) [1 + c_2 (r_2 - r_1)^2]. \quad (15)$$

From eigenfunction (14) we obtain the second approximation if $c_2 = 0$, and eigenfunction (15) if $c_1 = 0$ is substituted. The term $c_2 (r_2 - r_1)^2$ in the expression (15) suggests that the probability for the two electrons to occupy simultaneously the surfaces of two spheres of radius r_1 and r_2 , respectively, is greater in the case of eigenfunction Ψ'_3 than in the case of eigenfunction Ψ_1 given in (8). According to HYLLERAAS the electron configuration will then be of such character that we may speak of an "inner" and an "outer" electron, which means that the screening parameters γ_1 and γ_2 for the two electrons will be different. Thus, eigenfunction (15) is to very good approximation physically equivalent to the expression

$$\Psi'_3 = e^{-\gamma_1 r_1 - \gamma_2 r_2} + e^{-\gamma_2 r_1 - \gamma_1 r_2}. \quad (16)$$

Let us now consider the Table below, in which we have summarized, according to HYLLERAAS, the eigenvalues for the He atom corresponding to the various approximations. The percents are determined in such a way that the difference between the exact energy value and the eigenvalue belonging to the eigenfunction and consisting only of the product of one-electron eigenfunctions taken to be 100 percent. The Table indicates that the decrease in the energy eigenvalue is approximately the same when we pass over from eigenfunction (8) to eigenfunction (15) or (16). At the same time $\varepsilon_5 - \varepsilon_1 > \varepsilon_3 - \varepsilon_2$ and $\varepsilon_4 - \varepsilon_1 > \varepsilon_3 - \varepsilon_2$ i. e. the transition from eigenfunction (10) to (14) results in a much smaller decrease in the energy eigenvalue than the transition from (8) to (15), which latter is to good approximation equivalent to (16). Thus the effectiveness of the third approximation is roughly estimated by calculating the change brought about in the eigenvalue by passing from (8) to (16).

Table III

Eigenvalues of the electrons of the He atom in the ground state in various approximations and eigenvalue differences showing the effectiveness of each approximation. ε_6 denotes the empirical energy value. The energies are given in e^2/a_0 units. (According to HYLLERAAS [4])

Eigenfunction	Energy eigenvalue	Eigenvalue difference	%
(8)	$E_1 = 2,8476$	$E_6 - E_1 = 0,0559$	100
(10)	$E_2 = 2,8912$	$E_3 - E_2 = 0,0112$	20
(14)	$E_3 = 2,9024$	$E_4 - E_1 = 0,0292$	52
(15)	$E_4 = 2,8768$	$E_5 - E_1 = 0,0278$	50
(16)	$E_5 = 2,8754$		
	$E_6 = 2,9035$		

Let us substitute eigenfunction (16) into the Schrödinger energy expression. By simple calculation we obtain

$$\int \Psi_3''^* \mathbf{H} \Psi_3'' d\tau = \frac{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}{(\gamma_1 \gamma_2)^3} + 128 \frac{\gamma_1 \gamma_2}{(\gamma_1 + \gamma_2)^6} - 2 \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{(\gamma_1 \gamma_2)^3} - 128 \frac{1}{(\gamma_1 + \gamma_2)^5} + \left. \begin{aligned} &+ 2A \left[\frac{1}{\gamma_2^3(\gamma_1 + \kappa)^2} + \frac{1}{\gamma_1^3(\gamma_2 + \kappa)^2} \right] + \frac{128A}{(\gamma_1 + \gamma_2)^3 [\gamma_1 + \gamma_2 + 2\kappa]^2} + \\ &+ \frac{2}{\gamma_1^2 \gamma_2^2 (\gamma_1 + \gamma_2)} \left[1 + \frac{\gamma_1 \gamma_2}{(\gamma_1 + \gamma_2)^2} \right] + \frac{40}{(\gamma_1 + \gamma_2)^5}, \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

$$\int \Psi_3''^* \Psi_3'' d\tau = \frac{2}{(\gamma_1 \gamma_2)^3} + \frac{128}{(\gamma_1 + \gamma_2)^6}.$$

The parameters γ_1 and γ_2 are to be determined with the aid of the principle of minimum energy. Calculations have been carried out for the Na^- and K^- ions and the following results have been obtained: the eigenvalue of the Na^- ion is:

$$E(\text{Na}^-) = -0,1922 \frac{e^2}{a_0}$$

$$\gamma_1 = 0,36, \quad \gamma_2 = 0,12;$$

that of the K^- ion is

$$E(\text{K}^-) = -0,1618 \frac{e^2}{a_0}$$

$$\gamma_1 = 0,29, \quad \gamma_2 = 0,11.$$

Comparing these with the data in Table II we find that as compared to the eigenvalue obtained with the aid of eigenfunction (8) the energy decrease for the Na^- ion is 0,090 eV, and for the K^- ion is 0,055 eV. Assuming on the basis of HYLLERAAS's results that the introduction of the third approximation would modify the eigenvalues to a smaller extent, the significance of the third approximation appears to be negligibly small.

V. Discussion

As we have seen, GOMBÁS's method essentially consists in the modification of the potential, which greatly simplifies the HYLLERAAS type treatment of the problem. In the following we shall compare the results obtained here with experiment and with the results of earlier calculations. Calculations are available for the Ca atom with potential (2) by GOMBÁS [5], and for the negative ions Na^- and K^- in the first approximation by HARTREE [6]. Calculations taking into account the correlation between the electrons have been carried out for the Na^- ion by THALER [7], for the Na^- and K^- ions by GÁSPÁR and MOLNÁR [8]. The Li^- ion has been treated by WU [9].

On the basis of the calculation carried out for the Ca atom in section III the first ionization potential can be formed: $I = |E(\text{Ca})| - |E(\text{Ca}^+)|$, where $E(\text{Ca})$ and $E(\text{Ca}^+)$ are the valency electron eigenvalues of the neutral atom and the positive ion, respectively. Table II shows that $I = 5,76$ eV, whereas the experimental value is $I = 6,11$ eV. Thus the difference amounts to 5,7%. In the case of the eigenvalue of the neutral atom the agreement is still better; the calculated value is 17,63 eV, the experimental one is 17,98 eV, the error amounts to 1,9%. These results can be regarded as satisfactory and are in good

agreement with GOMBÁS's results mentioned above. Similar calculations have been carried out by HELLMANN for the ground state of the Mg atom. He obtained $I = 7,18$ eV, the experimental value is 7,64 eV; the difference amounts to 6% and the error in the eigenvalue of the neutral atom to 2%.

In the case of negative ions the analogue of I is the electron affinity of the atom. The affinity values obtained in the second approximation are summarized in Table II. Here experimental values are not available, we may, however, take account of the stability of alkali ions with the aid of a modified potential. On the basis of the results obtained for the Ca and the Mg atom good agreement with the real value can be expected. In the evaluation of the results the following must be taken into account. As is well known, HYLLERAAS carried out very accurate quantum mechanical calculations for the H^- ion. If, in addition to our affinity values for the alkali atoms, the value obtained by HYLLERAAS for the H atom $\varepsilon(H) = 0,718$ eV is also considered, the affinity values form a decreasing series from the H to the Cs atom, similarly as do the first ionization potentials of the alkaline earth atoms from Be to Ba. This seems to prove that the difference between the calculated and real values cannot be significant. [The anomaly in the affinity value obtained for Li is due to the fact that the constants of the potential for Li have been determined in a somewhat other way than the constants for the other atoms.] As for a comparison with earlier calculations the result obtained for Li by WU is $\varepsilon(Li) = 0,54$ eV, which is in good agreement with the one obtained here. With the value obtained by THALER $\varepsilon(Na) = 1,2$ eV and by GÁSPÁR and MOLNÁR $\varepsilon(Na) = 0,84$ eV, and $\varepsilon(K) = 0,82$ eV the results of the present calculation only agree in the order of magnitude. In all probability the reason for this is that the above authors have used an eigenfunction of different type. THALER orthogonalized the eigenfunction of the valency electron to the eigenfunctions of the core electrons, while GÁSPÁR and MOLNÁR introduced into the eigenfunction (10) SLATER type one-electron eigenfunctions. The problem how the form of the eigenfunction influences the calculation with HELLMANN's potential will be investigated at a later date.

Summarizing, we may state the following:

1. By introducing the modified potential HYLLERAAS's method can be applied to valency electrons situated outside atomic cores containing many electrons in a simple manner, the treatment of which on the assumption of a purely electrostatic potential field would involve great mathematical difficulties.

2. With the aid of HELLMANN's potential we can take account of the stability of negative alkali ions. The results obtained for the first ionization potential of the Mg and Ca atoms are in good agreement with experiment.

My thanks are due to Prof. P. GOMBÁS for reading the manuscript and for valuable advice.

LITERATURE

1. P. GOMBÁS, Zs. f. Phys., **118**, 164, 1941; Acta Phys. Hung. **1**, 285, 1952; Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, S. 150, Springer, Wien, 1949.
2. H. HELLMANN, Acta Physicochimica U. S. S. R. **1**, 913, 1935; J. Chem. Phys., **3**, 61, 1935.
3. Spectral data of the Li atom: LANDOLT-BÖRNSTEIN, Atom und Molekularphysik, Teil I, S. 53, Springer, Berlin, 1950.
4. E. A. HYLLERAAS, Zs. f. Phys., **54**, 347, 1929; **65**, 209, 1930.
5. P. GOMBÁS, Zs. f. Phys., **116**, 184, 1940; **119**, 318, 1942.
6. D. R. HARTREE and W. HARTREE, Proc. Camb. Phil. Soc., **34**, 550, 1938.
7. R. M. THALER, Phys. Rev., **83**, 131, 1951.
8. R. GÁSPÁR und B. MOLNÁR, Acta Phys. Hung., **5**, 75, 1955.
9. T. Y. WU, Phil. Mag., **22**, 837, 1936.

РАССЧЕТ ЭЛЕКТРОННОГО СРОДСТВА ЩЕЛОЧНЫХ АТОМОВ
И ЭНЕРГИИ ИОНИЗАЦИИ АТОМА Ca

Л. САС

Резюме

В работе разбирается разработанный Гомбашем метод, относящийся ко взаимодействию атомного остатка и валентных электронов. Как известно, сущность этого метода состоит в том, что условие, по которому собственная функция валентного электрона должна быть ортогональной собственным функциям электронов атомного остатка, заменимо репульсным потенциалом. С помощью полиэмпирического выражения потенциала, данного Гельманном, автор провел расчет для электронного сродства атомов щелочных металлов и собственного значения основного состояния атома Ca. Собственная функция двухэлектронной проблемы записана в учитывающей взаимодействие между электронами форме, которая соответствует второму приближению Гиллерасса, третье же приближение оценивалось. Расчет показывает, что метод Гомбаша может дать ответ на вопрос о стабильности отрицательных ионов щелочных металлов.



ON THE PRODUCTION OF PENETRATING PARTICLES BY NON-IONISING COSMIC RAYS

By

G. BOZÓKI; E. FENYVES and L. JÁNOSSY

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS, DEPARTMENT FOR COSMIC RAYS, BUDAPEST

(Received 30. III. 1956)

New measurements of the penetrating non-ionising component of cosmic rays are reported. The effect of anticoincidence counters shielding the arrangement from the sides is found to consist in a decrease of the background only. Experimental results found by ROY and CHAKRAVARTI are discussed critically.

§ 1. In a recent paper [1] ROY AND CHAKRAVARTI report measurements on the non-ionising component of cosmic rays with an arrangement somewhat similar to that used formerly by JÁNOSSY and ROCHESTER [2]. Roy and Chakravarti arrive, however, at conclusions different from those of the former authors. So as to shed light on the discrepancy we wish to make a few remarks on the paper of Roy and Chakravarti and to communicate the results of some recent measurements on the non-ionising component of cosmic rays carried out in our laboratory in Budapest.

§ 2. Using an anticoincidence arrangement of counters Roy and Chakravarti claim to have found a non-ionising component of much greater intensity than that found originally by Jánosy and Rochester; the discrepancy between the older measurements and the new ones is further enhanced by the fact that Roy and Chakravarti used an absorber of 10 cm Pb to filter the secondaries (given rise to by the non-ionising rays (absorber S_3 in Fig. 1 of Roy and Chakravarti's paper) while Jánosy and Rochester used only 2,2 cm Pb in the path of the secondaries. Thus the latter paper deals with a broader spectrum of primaries and ought to give a higher intensity.

The discrepancy between the reported results is interpreted by Roy and Chakravarti by assuming that the non-ionising rays give rise frequently to groups of ionising secondaries flying off at wide angles from the primary. In the case of Jánosy and Rochester such secondaries might be expected -- according to Roy and Chakravarti -- to set off the anticoincidence counters which were used to shield the arrangement from the side and therefore, if such secondaries really exist, the side counters would suppress a considerable portion of the anticoincidences which otherwise the non-ionising component might have given rise to (see Fig. 2 of Jánosy and Rochester). Roy and Chakravarti used a simple arrangement without side shield.

So as to clear up the question we have built an anticoincidence arrangement with side shield. In order to determine the role of the side shield, the discharge of the counters making up the side shield could be recorded separately. Thus it became possible to determine directly the effect of particles flying at wide angles from the primaries.

§ 3. The arrangement used in our experiments is shown in Fig. 1. The recorded coincidences (1, 2, 3) and simultaneously anticoincidences. The arrangement

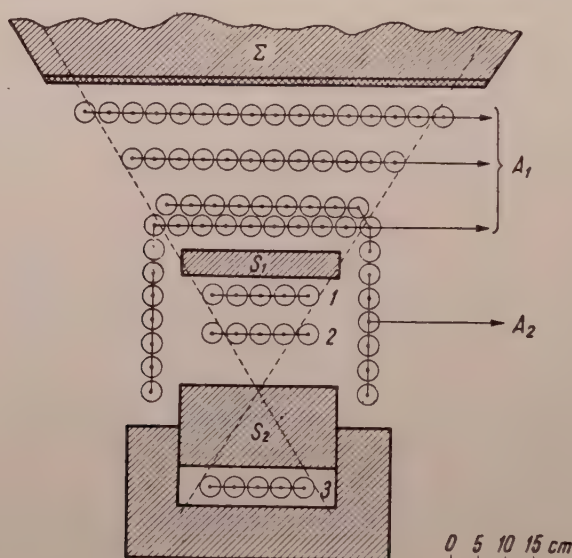


Fig. 1. The experimental arrangement. Anticoincidence counters A_2 shielding the arrangement from the front and back are not drawn.

Table I

Absorber (cm Pb)	time (hr)	(1, 2, 3) rate (c./hr)	(1, 2, 3, $-A_1$)		(1, 2, 3, $-A_1, -A_2$)		(1, 2, 3, $A_2, -A_1$)	
			total count	rate (a. c./hr)	total count	rate (a. c./hr)	total count	rate (a. c./hr)
$\Sigma = 2,5$ $S_1 = 5$ $S_2 = 15$	225	$2,507 \pm 3$	892	$3,96 \pm 0,13$	445	$1,98 \pm 0,09$	447	$1,99 \pm 0,09$
$\Sigma = 5$ « «	310	$2,416 \pm 3$	1232	$3,97 \pm 0,11$	615	$1,98 \pm 0,08$	617	$1,99 \pm 0,08$
$\Sigma = 10$ « «	301	$2,384 \pm 3$	1094	$3,64 \pm 0,11$	521	$1,73 \pm 0,08$	573	$1,90 \pm 0,08$
$\Sigma = 25$ « «	275	$2,149 \pm 3$	888	$3,23 \pm 0,11$	371	$1,35 \pm 0,07$	517	$1,88 \pm 0,08$
$\Sigma = 2,5$ $S_1 = 0$ $S_2 = 15$	192	$2,570 \pm 4$	575	$3,00 \pm 0,13$	266	$1,39 \pm 0,09$		
$\Sigma = 5$ « «	135	$2,527 \pm 4$	392	$2,90 \pm 0,15$	177	$1,31 \pm 0,10$		
$\Sigma = 10$ « «	164	$2,432 \pm 4$	499	$3,04 \pm 0,14$	229	$1,40 \pm 0,09$		
$\Sigma = 25$ « «	210	$2,257 \pm 3$	625	$2,98 \pm 0,12$	270	$1,29 \pm 0,08$		

coincidence battery was divided into two parts, A_1 covering the arrangement from the top and A_2 serving as side shield only.

Some of our observational results are collected in Table I. The errors given are always the *standard errors*, thus in the usual way each rate r and its standard error δr is given, obtained as

$$r \pm \delta r \equiv n/t \pm \sqrt{n}/t, \quad (1)$$

where n is the total number of coincidences registered during the time t .

§ 4. The rate of change of anticoincidence (1, 2, 3, — A_1), when increasing the upper shield Σ from 2,5 to 25 cm Pb without side shield, was obtained as

$$(3,96 \pm 0,13) - (3,23 \pm 0,11) = (0,73 \pm 0,17) \text{ a. c./hr.}$$

The latter rate is thus not very accurately determined on account of the high background rate. Putting in the side shield A_2 we found a decrease corresponding to a change of Σ from 2,5 to 25 cm Pb given by

$$(1,98 \pm 0,09) - (1,35 \pm 0,07) = (0,63 \pm 0,12) \text{ a. c./hr.}$$

The two values agree inside the uncertainty of measurement, the latter having a somewhat smaller standard error due to the smaller background in the presence of the side shield.

So as to observe the effect of the side shield with high precision, we measured also coincidences such that the side shield A_2 was coupled not to the anticoincidence system, but to the coincidence system. We thus counted anticoincidence (1, 2, 3, A_2 , — A_1), i. e. coincidences (1, 2, 3, A_2) not accompanied by discharge of A_1 . These anticoincidence are partly spurious, i. e. not caused by the effects of non-ionising primary agents. Roy and Chakravarti's hypothesis amounts to the assertion that most of these anticoincidence are real, i. e. caused by non-ionising agency. If this were indeed the case, the rate of anticoincidence (1, 2, 3, A_2 , — A_1) would have to decrease strongly with increasing thickness of the absorber Σ . In fact, however, the latter anticoincidence show no noticeable change with increasing absorber Σ .

In Fig. 2 we have plotted the rates of anticoincidence (1, 2, 3, — A_1) and (1, 2, 3, — A_1 , — A_2) as function of the thickness of Σ . The plots show clearly the absorption of the non-ionising primaries in Σ ; the plots of (1, 2, 3, A_2 , — A_1) given in Fig. 3 show, however, that the latter type of anticoincidence is not affected by Σ . We have thus to conclude that ionising secondaries flying off at large angles from the primary have only a negligible effect on the number of anticoincidence and such effects do not noticeably affect the measurements of the non-ionising component.

§ 5. It is thus proved by direct measurement that the discrepancy between the results of Roy and Chakravarti on the one hand and of Jánossy and Rochest on the other is not caused by side particles as the latter have practically no effect

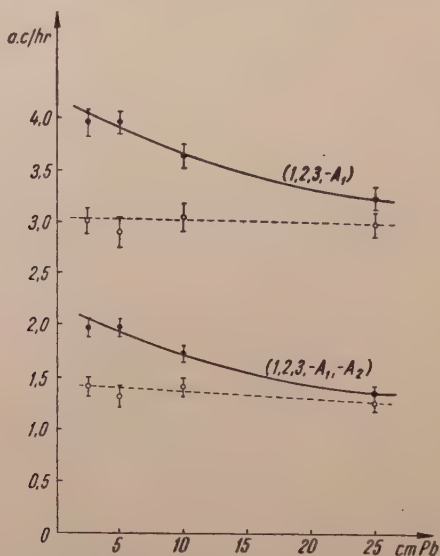


Fig. 2. Anticoincidence rates as function of the thickness of the absorber Σ . The dashed lines represent the backgrounds

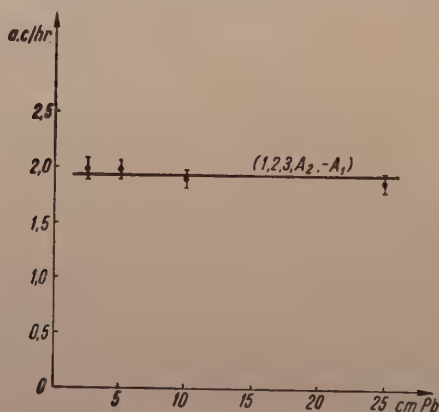


Fig. 3. The effect of the side counters

on the genuine anticoincidence rate. Considering the data published by Roy and Chakravarti we are of the opinion that in fact there is no real discrepancy between the two sets of results if we consider the latter results critically. Roy and Chakravarti overestimate the accuracy of their measurements to a great extent and thus the large effects found by them are most likely spurious and the

Differences of counting rates reported are caused largely by normal statistical fluctuation.

As an example Roy and Chakravarti found the following rates of anti-coincidences r :

Table II

Arrangement	Number of anticoincidences	Counts per hour
$7 = 2,5 \text{ cm Pb etc. (Table I, R. and Ch.)} \dots\dots$	150	$0,312 \pm 0,026$ (0,018)
$7 = 13 \text{ cm Pb } \left. \begin{array}{l} \\ 10 \text{ cm Fe} \end{array} \right\} \text{ etc. (Table IV, R. and Ch.)} \dots\dots$	72	$0,250 \pm 0,029$ (0,01)

The standard errors are calculated according to equ. (1), while the numbers in brackets are those given by Roy and Chakravarti obtained by an erroneous* method. The difference of the above counting rates is thus

$$(0,312 \pm 0,026) - (0,250 \pm 0,029) = (0,062 \pm 0,039) \text{ a. c./hr.}$$

Thus the effect does not exceed even the twofold standard error, thus the measurements are not suitable to ascertain that there is an effect at all caused by the change of Σ . From such a measurement it cannot be established how big such an effect is (if it exists at all). In conclusion we find that the accuracy of the measurements of Roy and Chakravarti is too small to give reliable information about the non-ionising component of cosmic rays.

* The authors take as the error of their measured values

$$\delta^* x^2 = \frac{1}{N-1} \Sigma (x_i - \bar{x})^2; \quad x_i = n_i/t,$$

where the n_i are the counts during periods t . The correct procedure would have been to take

$$\delta x^2 = \frac{\Sigma n_i}{(Nt)^2}.$$

It is true that the expectation value of $\delta^* x^2$ is the same as that of δx^2 . However, if by chance for a particular set of measurements

$$\delta^* x^2 \ll \delta x^2,$$

it does not mean that this set gives a better approximation for the average value than is usually to be expected. On the contrary — if we find that the values scatter around the average noticeably less than can be expected for a Poisson distribution — then the possibility must be considered that something is systematically wrong with the measurements. In the four Tables given by Roy and Chakravarti each represents a set of readings which scatter less than is to be expected on general statistical grounds, and it is just this small scatter of the values which casts to some extent doubt on the measurements themselves.

REFERENCES

- S. B. ROY and R. CHAKRAVARTI, *Ind. J. Phys.*, **28**, 167, 1954.
L. JÁNOSSY and G. ROCHESTER, *Proc. Roy. Soc. A*, **181**, 399, 1943.

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ПРОНИКАЮЩИХ ЧАСТИЦ ПОД ВЛИЯНИЕМ
НЕИОНИЗИРУЮЩИХ КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ

Г. БОЗОКИ, Э. ФЕНЬВЕШ и Л. ЯНОШШИ

Резюме

Описываются новые измерения, относящиеся к проникающему неионизирующему компоненту космических лучей. Действие счетчиков, включенных в антисовпадения и экранирующих установку с боковых сторон, состоит только в том, что они уменьшают фон. Разбираются экспериментальные данные Роя и Чакраварти с критической точки зрения.

ÜBER DIE WANDERUNG DER MOLEKÜLE IN EINEM GASE, I

Von

CHR. CHRISTOV

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER BULGARISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN, SOFIA

(Vorgelegt von L. Jánosy. — Eingegangen 30. III. 1956)

Es sei ein Gas gegeben, dessen Moleküle als starrelastische Kugeln betrachtet werden können. Es sei $W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v})d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ die Wahrscheinlichkeit, dass ein Gasmolekül, das in einem gegebenen Augenblick eine gegebene Geschwindigkeit \mathbf{u} hat, nach einem gegebenen Zeitintervall t eine Verschiebung zwischen \mathbf{r} und $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ erfährt und eine Geschwindigkeit zwischen \mathbf{v} und $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ annimmt. Für die Funktion W werden eine Integralgleichung (20), eine Reihenentwicklung (22) und zwei Differentialgleichungen (32) und (34) angegeben.

Die zufällige Wanderung der in einem Gase oder in einer Flüssigkeit suspendierten Kolloidteilchen — die Brownsche Bewegung — wurde bereits ausführlich untersucht [1, 2, 3, 4]. Es wurde bei diesen Untersuchungen stets vorausgesetzt, dass die Masse des wandernden Teilchens viel grösser sei als die Masse der Moleküle, unter deren Stössen es sich bewegt. Es gibt dagegen wenig Arbeiten, in denen die Wanderung der Gasmoleküle selbst untersucht wird [5, 5 · 1063, 6]. In der vorliegenden Arbeit bestimmen wir die Wahrscheinlichkeit

$$dW = W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v})d\mathbf{r}d\mathbf{v} \quad (d\mathbf{r} = dx dy dz, \quad d\mathbf{v} = dv_x dv_y dv_z), \quad (1)$$

dass ein Gasmolekül A , das in einem gegebenen Augenblick eine gegebene Geschwindigkeit \mathbf{u} besitzt, nach einer gegebenen Zeit t eine Verschiebung zwischen \mathbf{r} und $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ erfährt und eine Geschwindigkeit zwischen \mathbf{v} und $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ annimmt, d. h. die Wahrscheinlichkeit, dass ein sich in einem gegebenen Augenblick in einem bestimmten Punkt des Phasenraumes befindendes Molekül nach einer gewissen Zeit in ein bestimmtes Elementarvolumen desselben Raumes gerät. Die analoge Aufgabe für die Brownsche Bewegung der in einem Gase oder in einer Flüssigkeit suspendierten Kolloidteilchen wurde von KRAMERS und CHANDRASEKHAR gelöst [3, 4].

Bei der Lösung des Problems werden wir annehmen, dass das Gas sich makroskopisch in Ruhe befindet, ferner dass seine absolute Temperatur T sowie seine durch die mittlere Anzahl der Moleküle pro Volumeneinheit gemessene Dichte n räumlich und zeitlich konstant bleiben, und schliesslich dass die Moleküle als vollkommen glatte starrelastische Kugeln, zwischen denen nur die elastischen Kräfte bei den Zusammenstössen wirken, betrachtet werden können. Es sei a der Durchmesser des Moleküls, m — seine Masse und \bar{u} — die mittlere

quadratische Geschwindigkeit. Nach dem Maxwellschen Geschwindigkeitsverteilungsgesetz ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Molekül eine Geschwindigkeit zwischen u und $u + du$ besitzt, durch

$$dV = V(u)du = \frac{1}{\pi^{3/2} c^3} e^{-\frac{u^2}{c^2}} du \quad (du = du_x du_y du_z)$$

gegeben, wo

$$c^2 = \frac{2}{3} \bar{u}^2 = 2kT/m$$

das Quadrat der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit der Gasmoleküle darstellt.

Nach [6] und [7] lautet die Wahrscheinlichkeit, dass ein mit einer Geschwindigkeit u sich bewegendes Molekül A einen Stoß im Zeitintervall erleidet und dabei eine Geschwindigkeit zwischen v und $v + dv$ erhält, wo folgt

$$dP = P(u, v) dt dv = \frac{a^2 n^*}{\sqrt{\pi} c w} e^{-\frac{(v \cdot w)^2}{c^2 w^2}} dt dv \quad (w = v - u).$$

Die Wahrscheinlichkeit für dasselbe Ereignis ohne Rücksicht auf die Geschwindigkeit nach dem Stoß ist

$$dp = p dt = a^2 c n^* F\left(\frac{u}{c}\right) dt,$$

$$\left(F(s) = \sqrt{\pi} e^{-s^2} + \sqrt{\pi} \left(2s + \frac{1}{s}\right) \int_0^s e^{-z^2} dz\right).$$

Dabei bedeutet

$$n^* = n + \frac{5\pi}{16} a^3 n^2 + \dots$$

die mittlere Dichte des Gases im Abstand a vom Zentrum des Moleküls [7, 8].

Die Übergangswahrscheinlichkeit dW kann in der Form

$$dW = \sum_{k=0}^{\infty} dW_k = \sum_{k=0}^{\infty} W_k(t, r, u, v) dr dv$$

dargestellt werden, wo $W_k dr dv$ die Wahrscheinlichkeit für denselben Übergang darstellt, bei der zusätzlichen Bedingung, dass das Molekül dabei k Stöße erleidet.

Es sei t_0 die vom Augenblick $t = 0$ bis zum Augenblick des ersten Stoßes verfllossene Zeit, t_1 — die Zeit vom ersten bis zum zweiten Stoß, t_2 — vom zweiten bis zum dritten usw., t_k — die Zeit vom letzten, k -ten Stoß bis zu

Zeit t , für welchen wir die Wahrscheinlichkeit dW suchen. Es seien $\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k$ die entsprechenden Geschwindigkeiten des Moleküls A . (\mathbf{v}_0 fällt mit \mathbf{u} zusammen). Dann ist es klar, dass die Wahrscheinlichkeit, dass das Molekül A während der Zeit t_0 mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_0 fliegt und im Zeitintervall dt_0 einen Stoss erleidet, demzufolge eine Geschwindigkeit zwischen \mathbf{v}_1 und $\mathbf{v}_1 + d\mathbf{v}_1$ erhält, sodann während der Zeit t_1 mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_1 fliegt und im Zeitintervall dt_1 einen Stoss erleidet, demzufolge eine Geschwindigkeit zwischen \mathbf{v}_2 und $\mathbf{v}_2 + d\mathbf{v}_2$ erhält usw. bis es schliesslich während der Zeit t_k mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_k fliegt, nach der Multiplikationsregel der Wahrscheinlichkeiten durch den Ausdruck

$$e^{-P(v_0)t_0} P(\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1) dt_0 d\mathbf{v}_1 e^{-P(v_1)t_1} P(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) dt_1 d\mathbf{v}_2 \times \dots \times e^{-P(v_{k-1})t_{k-1}} P(\mathbf{v}_{k-1}, \mathbf{v}_k) e^{-P(v_k)t_k} \quad (8)$$

gegeben ist [6]. Bei der Aufstellung dieser Formel wurde, wie üblich, die Annahme gemacht, dass die Wahrscheinlichkeiten pdt und $Pd\mathbf{v}dv$ von den Geschwindigkeiten des Moleküls A vor — bzw. vor und nach dem Stoss, nicht aber von der vorangehenden Bewegung von A abhängen, so dass die zusammengesetzte Wahrscheinlichkeit [8] sich als Produkt der elementaren Wahrscheinlichkeiten erweist. Eigentlich bedeutet dies eine Näherung, da die Dichte n^* in der Umgebung von A von der vorangehenden Bewegung abhängen kann, wenn auch nur sehr schwach bei nicht zu hohen mittleren Dichten n [9]. Das ist die einzige vereinfachende Annahme, die wir bei der Lösung der gestellten Aufgabe machen. Um dW_k zu bekommen, genügt es (8) über t_0, t_1, \dots, t_k und $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$ zu integrieren, unter den zusätzlichen Bedingungen, dass die gesamte räumliche Verschiebung $\mathbf{v}_0 t_0 + \mathbf{v}_1 t_1 + \dots + \mathbf{v}_k t_k$ zwischen \mathbf{r} und $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$, die Endgeschwindigkeit \mathbf{v}_k zwischen \mathbf{v} und $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ liegt und die gesamte Zeit $t_0 + t_1 + \dots + t_k$ gleich t ist. Es lassen sich diese Einschränkungen des Integrationsgebietes vermeiden, wenn man den Ausdruck (8) mit den Diracschen Funktionen

$$\delta(\mathbf{v}_0 t_0 + \mathbf{v}_1 t_1 + \dots + \mathbf{v}_k t_k - \mathbf{r}) d\mathbf{r} \delta(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) d\mathbf{v} \delta(t_0 + t_1 + \dots + t_k - t)$$

multipliziert. Also ist

$$W_k = \int_{t_0=0}^{\sim} \int_{t_1=0}^{\sim} \dots \int_{t_k=0}^{\sim} \int_{\mathbf{v}_1} \int_{\mathbf{v}_2} \dots \int_{\mathbf{v}_k} e^{-P(v_0)t_0 - P(v_1)t_1 - \dots - P(v_k)t_k} \times \\ \times P(\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1) P(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \dots P(\mathbf{v}_{k-1}, \mathbf{v}_k) \times \\ \times \delta(\mathbf{v}_0 t_0 + \mathbf{v}_1 t_1 + \dots + \mathbf{v}_k t_k - \mathbf{r}) \delta(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) \delta(t_0 + t_1 + \dots + t_k - t) \times \\ \times dt_0 dt_1 \dots dt_k d\mathbf{v}_0 d\mathbf{v}_1 \dots d\mathbf{v}_k \cdot *) \quad (9)$$

* Wenn die Integrationsgrenzen $-\sim$ und $+\sim$ sind, werden wir sie der Kürze halber nicht bezeichnen.

Um hier die Integration nach t_0, t_1, \dots, t_k bei Aufrechterhaltung der Symmetrie des Ausdruckes bezüglich $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$ durchzuführen, stellen wir die Diracschen Funktionen als Fourierintegrale dar:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\omega t} d\omega, \quad \delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} d\boldsymbol{\kappa}. \quad (1)$$

Also ist

$$\begin{aligned} W_k(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \iint e^{i\omega t + i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} d\omega d\boldsymbol{\kappa} \times \\ &\times \int_{t_0=0}^{\sim} \int_{t_1=0}^{\sim} \dots \int_{t_k=v}^{\sim} \int \dots \int \prod_{h=1}^k P(\mathbf{v}_{h-1}, \mathbf{v}_h) d\mathbf{v}_h \times \\ &\times \delta(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) \prod_{h=0}^K e^{-P(v_h) + i\omega + i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{v}_h} t_h dt_h. \end{aligned}$$

Ebenso stellen wir die Funktionen W_k als Fourierintegrale nach t und \mathbf{r} dar:

$$W_k(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \iint F_k(\omega, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}) e^{i\omega t + i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} d\omega d\boldsymbol{\kappa}. \quad (11)$$

Die Gegenüberstellung dieser zwei Ausdrücke ergibt nach Ausführung der Integration über t_h im ersten

$$F_k(\omega, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}) = \frac{1}{p(v_0) + i\omega + i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{v}_0} \iint \dots \int \delta(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) \prod_{h=1}^k \frac{P(\mathbf{v}_{h-1}, \mathbf{v}_h) d\mathbf{v}_h}{p(v_h) + i\omega + i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{v}_h}. \quad (12)$$

Die Funktion W lässt sich auch als Fourierintegral entwickeln:

$$W(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \iint F(\omega, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}) e^{i\omega t + i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}} d\omega d\boldsymbol{\kappa}. \quad (13)$$

Aus (11), (12) und (13) erhalten wir für diese Fourieramplitude

$$\begin{aligned} F(\omega, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}) &= \frac{1}{p(v_0) + i\omega + i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{v}_0} \times \\ &\times \sum_{k=0}^{\sim} \int_{\mathbf{v}_1} \int_{\mathbf{v}_2} \dots \int_{\mathbf{v}_k} \delta(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}) \prod_{h=1}^k \frac{P(\mathbf{v}_{h-1}, \mathbf{v}_h) d\mathbf{v}_h}{p(v_h) + i\omega + i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{v}_h}. \end{aligned} \quad (14)$$

Dieser Ausdruck ist von der allgemeinen Form der Lösung einer inhomogenen linearen Integralgleichung, die man nach dem Iterationsverfahren erhält. Ersetzen wir wieder \mathbf{v}_0 durch \mathbf{u} , so folgt, dass F genau die Lösung der Gleichung

$$\begin{aligned} (p(u) + i\omega + i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{u}) F(\omega, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) &= \delta(\mathbf{u} - \mathbf{v}) + \\ &+ \int P(\mathbf{u}, \mathbf{w}) F(\omega, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{w}, \mathbf{v}) d\mathbf{w} \end{aligned} \quad (15)$$

darstellt.

Wir werden eine ähnliche Gleichung für W selbst aufstellen. Lösen wir zuerst (13) nach F auf:

$$F(\omega, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{t=0}^{\infty} \int W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) e^{-i\omega t - i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r}} dtd\mathbf{r}. \quad (16)$$

Setzen wir diesen Wert von F in (15) ein, so erhalten wir die folgende Gleichung für W :

$$\begin{aligned} \int_{t=0}^{\infty} \int W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) e^{-i\omega t - i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r}} dtd\mathbf{r} &= \frac{\delta(\mathbf{u} - \mathbf{v})}{p(\mathbf{u}) + i\omega + i\mathbf{x} \cdot \mathbf{u}} + \\ &+ \int_{t=0}^{\infty} \int \int \frac{P(\mathbf{u}, \mathbf{w}) e^{-i\omega t - i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r}}}{p(\mathbf{w}) + i\omega + i\mathbf{x} \cdot \mathbf{w}} W(t, \mathbf{r}, \mathbf{w}, \mathbf{v}) dtd\mathbf{r}d\mathbf{w}. \end{aligned} \quad (17)$$

Es ist nicht schwer, z. B. mit Hilfe des Theorems der Residuen, nachzuprüfen, dass

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{\omega=0}^{\infty} \int \frac{e^{i\omega(t-\tau) + i\mathbf{x} \cdot (\mathbf{r}-\varrho)}}{p(\mathbf{u}) + i\omega + i\mathbf{x} \cdot \mathbf{u}} d\omega d\mathbf{x} &= \\ = e^{-p(\mathbf{u})(t-\tau)} \delta(\mathbf{r} - \varrho - \mathbf{u}(t-\tau)) \varepsilon(t-\tau) \end{aligned} \quad (18)$$

ist, wo

$$\varepsilon(t) = 0 \quad \text{bei} \quad t < 0 \quad \text{und} \quad \varepsilon(t) = 1 \quad \text{bei} \quad t > 0$$

ist. Nun schreiben wir in der Gleichung (17) τ und ϱ anstatt t und \mathbf{r} , multiplizieren sie mit $\frac{1}{(2\pi)^4} e^{-i\omega t - i\mathbf{x} \cdot \mathbf{r}}$ und integrieren sodann nach τ und ϱ . Mit Rücksicht auf (10) und (18) erhalten wir die gesuchte Gleichung für W :

$$\begin{aligned} W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) &= e^{-p(\mathbf{u})t} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{u}t) \delta(\mathbf{u} - \mathbf{v}) + \\ &+ \int_{\tau=0}^t \int \int P(\mathbf{u}, \mathbf{w}) e^{-p(\mathbf{u})(t-\tau)} \delta(\mathbf{r} - \varrho - \mathbf{u}(t-\tau)) W(\tau, \varrho, \mathbf{w}, \mathbf{v}) d\tau d\varrho d\mathbf{w}. \end{aligned} \quad (19)$$

Die Integration nach ϱ kann unmittelbar ausgeführt werden, so dass man diese Gleichung auch in der Form

$$\begin{aligned} W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) &= e^{-p(\mathbf{u})t} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{u}t) \delta(\mathbf{u} - \mathbf{v}) + \\ &+ \int_{\tau=0}^t \int P(\mathbf{u}, \mathbf{w}) e^{-p(\mathbf{u})\tau} W(t-\tau, \mathbf{r} - \mathbf{u}\tau, \mathbf{w}, \mathbf{v}) d\tau d\mathbf{w} \end{aligned} \quad (20)$$

schreiben kann.

Um W zu finden, müssen wir also die lineare inhomogene Integralgleichung (19) oder (20) lösen. Die Existenz und die Eindeutigkeit der Lösung ist nach der allgemeinen Theorie dieser Gleichungen gesichert. Der Sinn der Glieder dieser Gleichung ist klar. Das erste Glied auf der rechten Seite entspricht der Wahrscheinlichkeit, dass das Molekül A die gewünschte Verschiebung im Phasenraum erfährt, ohne dabei irgendeinen Stoss zu erleiden. Der Integrand entspricht dagegen der Wahrscheinlichkeit, dass das Molekül A während der Zeit τ fliegt, ohne Stösse zu erleiden, dann im Zeitintervall $d\tau$ einen Stoss erleidet, demzufolge es eine Geschwindigkeit zwischen \mathbf{w} und $\mathbf{w} + d\mathbf{w}$ erhält und sodann bis zum Augenblick t den Rest der gewünschten Verschiebung im Phasenraum zurücklegt. Gleichungen, die eine gewisse Ähnlichkeit mit (20) zeigen, die sich aber auf die Ausbreitung der kosmischen Kaskadenschauer beziehen, wurden von L. JÁNOSSY gegeben [10].

Nach dem Iterationsverfahren erhalten wir die Lösungen von (15) und (20) in der Form

$$F(\omega, \mathbf{z}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \frac{\delta(\mathbf{u} - \mathbf{v})}{p(u) + i\omega + i\mathbf{z} \cdot \mathbf{u}} + \frac{P(\mathbf{u}, \mathbf{v})}{(p(u) + i\omega + i\mathbf{z} \cdot \mathbf{u})(p(v) + i\omega + i\mathbf{z} \cdot \mathbf{v})} + \int \frac{P(\mathbf{u}, \mathbf{w}) P(\mathbf{w}, \mathbf{v}) d\mathbf{w}}{(p(u) + i\omega + i\mathbf{z} \cdot \mathbf{u})(p(w) + i\omega + i\mathbf{z} \cdot \mathbf{w})(p(v) + i\omega + i\mathbf{z} \cdot \mathbf{v})} + \dots \quad (21)$$

$$W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = e^{-p(u)t} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{u}t) \delta(\mathbf{u} - \mathbf{v}) + \\ + P(\mathbf{u}, \mathbf{v}) e^{-p(v)t} \int_{\tau=0}^t e^{-(p(u)-p(v))\tau} \delta(\mathbf{v}t - \mathbf{r} + (\mathbf{u} - \mathbf{v})\tau) d\tau + \\ + e^{-p(v)t} \int_{\tau=0}^t \int_{\tau'=0}^{t-\tau} P(\mathbf{u}, \mathbf{w}) P(\mathbf{w}, \mathbf{v}) e^{-(p(u)-p(v))\tau - (p(w)-p(v))\tau'} d\tau d\tau' + \dots \quad (22)$$

Die Geschwindigkeit \mathbf{w} im letzten Integral ist dabei aus der Gleichung

$$\mathbf{v}t - \mathbf{r} + (\mathbf{u} - \mathbf{v})\tau + (\mathbf{w} - \mathbf{v})\tau' = 0$$

zu bestimmen.

Die Glieder von (22) entsprechen den Übergangswahrscheinlichkeiten dW_k (7) und die Glieder von (21) sind die entsprechenden Fourieramplituden F_k (12). Aus dieser physikalischen Deutung wie auch aus der allgemeinen Theorie der Integralgleichungen ersieht man, dass diese unendlichen Reihen konvergieren.

Da wir die Nachwirkung der vorangehenden Bewegung von A auf $p(u)$ und $P d\mathbf{u} d\mathbf{v}$ vernachlässigen, ist es klar, dass W der SMOLUCHOWSKISCHEN Gleichung

$$W(t + \Delta t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \iint W(\Delta t, \mathbf{s}, \mathbf{u}, \mathbf{u} - \mathbf{w}) W(t, \mathbf{r} - \mathbf{s}, \mathbf{u} - \mathbf{w}, \mathbf{v}) d\mathbf{s} d\mathbf{w} \quad (23)$$

oder auch

$$W(t + \Delta t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \iint W(t, \mathbf{r} - \mathbf{s}, \mathbf{u}, \mathbf{v} - \mathbf{w}) W(\Delta t, \mathbf{s}, \mathbf{v} - \mathbf{w}, \mathbf{v}) d\mathbf{s} d\mathbf{w} \quad (24)$$

für beliebige t, r, u, v und Δt genügt. Es lassen sich bekanntlich diese Integralgleichungen in Differentialgleichungen umwandeln [4]. Für die erste genügt es $W(t + \Delta t, r, u, v)$ und $W(t, r-s, u-w, v)$ in Potenzreihen nach Δt bzw. nach s und w zu entwickeln. Die Gleichung erhält die Gestalt

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \Delta t^k W_{t^k} = \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \frac{(-1)^n}{n!} A_{mn}(\Delta t, u) \cdot W_{r^m u^n}, \quad (25)$$

wo

$$A_{mn}(\Delta t, u) = \int \int s^m w^n W(\Delta t, s, u, u-w) ds dw \quad (26)$$

ist. Die Indices r^m, u^n und t^k bei W bezeichnen eine m -malige Differentiation nach r , eine n -malige nach u und eine k -malige nach t . Da r und u vektorielle Argumente sind, müssen wir die Ableitungen nach r und u als Bildung der entsprechenden Gradienten auffassen. Die Grössen $s^m w^n$, A_{mn} und $W_{r^m u^n}$ sind Tensoren $m + n$ -ten Ranges und $A_{mn} \cdot W_{r^m u^n}$ stellt das skalare Produkt von A_{mn} und $W_{r^m u^n}$ dar. Entwickeln wir die Grössen A_{mn} in Potenzreihen nach Δt , und setzen wir das Resultat in (25) ein, so müssen die Koeffizienten derselben Potenzen von Δt auf beiden Seiten der Gleichung gleich sein. Der Vergleich der Koeffizienten von Δt ergibt die gesuchte Gleichung. (Die Gegenüberstellung der anderen Koeffizienten gibt nichts Neues.) Bei Berechnung von A_{mn} nach (26) brauchen wir also auch nur die nach Δt linearen Glieder zu berücksichtigen. Da aber der Hauptwert von W_k von der Ordnung Δt^k ist, ist es klar, dass wir bei Berechnung von A_{mn} nur die ersten zwei Glieder in (22) zu berücksichtigen brauchen. Also ist

$$A_{mn} = A_{mn}^0 + A_{mn}^1$$

bei

$$A_{mn}^0 = \int \int s^m w^n e^{-p(\sqrt{(u-w)^2}) \Delta t} \delta(s - (u - w) \Delta t) \delta(w) ds dw,$$

$$A_{mn}^1 = \int \int_{\tau=0}^{\Delta t} s^m w^n P(u, u-w) e^{-p(u)\tau - p(\sqrt{(u-w)^2})(t-\tau)} \times \\ \times \delta((u - w) \Delta t - s - w\tau) d\tau ds dw.$$

(Die Integration des Ausdruckes für A_{mn}^0 kann unmittelbar durchgeführt werden:

$$A_{mn}^0 = \begin{cases} u^m \Delta t^m e^{-p(u)\Delta t} & \text{bei } n = 0, \\ 0 & \text{bei } n > 0. \end{cases}$$

Beschränken wir uns also auf die Glieder bis zur ersten Ordnung in Bezug auf Δt , so ersieht man gleich, dass die einzigen nicht verschwindenden Grössen A_{mn}^0

$$A_{00}^0 = 1 - p(u)\Delta t \quad \text{und} \quad A_{10}^0 = u\Delta t$$

sind. Die Integration nach s im Ausdrucke für A_{mn}^1 erfolgt leicht:

$$A_{mn}^1 = \int \int_{\tau=0}^{\Delta t} (\mathbf{u} \Delta t - \mathbf{w} (\Delta t - \tau))^m \mathbf{w}^n \times \\ \times P(\mathbf{u}, \mathbf{u} - \mathbf{w}) e^{-p(u)\tau - p(\sqrt{\mathbf{u}-\mathbf{w}})(\Delta t - \tau)} d\tau d\mathbf{w}.$$

Also bis auf die Glieder erster Ordnung haben wir

$$A_{mn}^1 = \begin{cases} (-1)^n \Delta t A_n(\mathbf{u}) & \text{bei } m = 0, \\ 0 & \text{bei } m > 0, \end{cases}$$

wo

$$A_n(\mathbf{u}) = \int \mathbf{w}^n P(\mathbf{u}, \mathbf{u} + \mathbf{w}) d\mathbf{w} \quad (24)$$

ist. Setzen wir diese Ausdrücke in (25) ein, so bekommen wir

$$W_t + \mathbf{u} \cdot \mathbf{W}_r = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} A_n(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{W}_u^n. \quad (25)$$

Das ist eine lineare homogene partielle Differentialgleichung für W bei unabhängigen Veränderlichen t, \mathbf{r} und \mathbf{u} . Die Veränderliche v erscheint nur als Parameter.

Da $A_n(\mathbf{u})$ ein Tensor n -ten Ranges ist, der nur von einem Vektorargument \mathbf{u} abhängt, lässt er sich in der Form

$$A_n(\mathbf{u}) = \sum_{k=0}^{n/2} A_{k, n-2k}(u) u^{2k} \mathbf{u}^{n-2k} \delta^k \quad (26)$$

schreiben. Hier ist δ der Einheitstensor zweiten Ranges und δ^k der Einheitstensor $2k$ -ten Ranges, der die k -te tensorielle Potenz von δ darstellt. Die Koeffizienten A_{kl} sind Skalare (also nicht Tensoren), die nur von der Grösse u des Vektors \mathbf{u} abhängen. Somit ist das Auffinden der Tensoren $A_n(\mathbf{u})$ auf das der Skalare A_{kl} ($k = 1, 2, \dots \leq \frac{n}{2}$; $l = n - 2k$) zurückgeführt. Um diese zu

berechnen, nehmen wir vorläufig an, dass die z -Achse mit der Richtung von \mathbf{u} zusammenfällt — die Skalare A_{kl} bleiben dabei ungeändert. Es sei $A_{x^{2k}z^l}$ die $\underbrace{x \dots x}_{2k} \underbrace{z \dots z}_l$ -te Komponente des Tensors A_n ($n = 2k + l$), die gemäss

(27) durch den Ausdruck

$$A_{x^{2k}z^l}(u) = \int w_x^{2k} w_z^l P(\mathbf{u}, \mathbf{u} - \mathbf{w}) d\mathbf{w} \quad \text{bei } \mathbf{u} = (0, 0, u) \quad (30)$$

gegeben ist. Berücksichtigen wir, dass bei dieser Auswahl des Koordinatensystems

tems die einzige von Null verschiedene Komponente des Tensors $u^l u_{zl}^l$ ist, und dass ihr Wert u^l ist, so erhalten wir aus (29)

$$A_{kl} = \frac{1}{u^{2k+l}} (A_{x^{2k}z^l} - A_{x^{2k+2}z^{l-2}}), \quad (31)$$

wobei wir unter $A_{x^{2k}z^{l-2}}$ für $l \leq 1$ einfach Null zu verstehen haben. Die Gleichungen (30) und (31) ermöglichen die Berechnung der Koeffizienten A_{kl} .

Wegen (29) lässt sich die Gleichung (28) in der Form

$$W_t + \mathbf{u} \cdot \mathbf{W}_r = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+l)!} A(u)_{kl} u^{2k} \mathbf{u}^l \cdot \nabla_u^l \Delta_u^k W \quad (32)$$

schreiben. Dabei ist ∇_u bzw. Δ_u der Hamiltonsche, bzw. der Laplacesche Differentialoperator in Bezug auf die vektorielle Veränderliche \mathbf{u} . Der Operator ∇_u^l ist die l -te tensorielle Potenz von ∇_u und $\mathbf{u}^l \cdot \nabla_u^l$ ist das skalare Produkt der Tensoren \mathbf{u}^l und ∇_u^l . Das Zeichen ' bei dem Summenzeichen bedeutet, dass das Glied $k = l = 0$ fehlt.

Die Gleichung (24) kann ähnlicherweise in eine Differentialgleichung umgewandelt werden. Setzen wir zu diesem Zwecke erstens

$$W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = V(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v} - \mathbf{u})$$

an, so dass die Funktion $W(\Delta t, \mathbf{s}, \mathbf{v} - \mathbf{w}, \mathbf{v})$ in (24) sich in der Form $V(\Delta t, \mathbf{s}, \mathbf{v} - \mathbf{w}, \mathbf{w})$ schreiben lässt. Entwickeln wir dann die Funktion $W(t, \mathbf{r} - \mathbf{s}, \mathbf{u}, \mathbf{v} - \mathbf{w})$ nach Potenzen von \mathbf{s} und die Funktion $W(t + \Delta t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v})$ nach Potenzen von Δt , so bekommen wir aus (24)

$$W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) + \Delta t W_t(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \int \int \mathbf{s}^m W_{r^m}(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v} - \mathbf{w}) V(\Delta t, \mathbf{s}, \mathbf{v} - \mathbf{w}, \mathbf{w}) d\mathbf{s} d\mathbf{w}.$$

Berücksichtigen wir, dass

$$\begin{aligned} & W_{r^m}(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v} - \mathbf{w}) V(\Delta t, \mathbf{s}, \mathbf{v} - \mathbf{w}, \mathbf{w}) = \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \mathbf{w}^n \cdot [V(\Delta t, \mathbf{s}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) W_{r^m}(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v})]_{\mathbf{v}^n} \end{aligned}$$

ist, so lässt sich obige Gleichung in der Form

$$W + \Delta t W_t = \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \frac{(-1)^n}{n!} \nabla_v^n (B(\Delta t, \mathbf{v})_{mn} \cdot W_{v^m})$$

umschreiben, wo mit Rücksicht auf (26)

$$\begin{aligned} B(\Delta t, \mathbf{v})_{mn} &= \int \int \mathbf{s}^m \mathbf{w}^n V(\Delta t, \mathbf{s}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) d\mathbf{s} d\mathbf{w} = \\ &= \int \int \mathbf{s}^m \mathbf{w}^n W(\Delta t, \mathbf{s}, \mathbf{v}, \mathbf{v} + \mathbf{w}) d\mathbf{s} d\mathbf{w} = (-1)^n A(\Delta t, \mathbf{v})_{mn} \end{aligned}$$

ist. Also bei Wiederholung der Umformungen von (28) erhalten wir endgültig

$$W_t + \mathbf{v} \cdot \mathbf{W}_r = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \nabla_v^n \cdot (A_n(\mathbf{v}) \mathbf{W}) \quad (32)$$

oder

$$W_t + \mathbf{v} \cdot \mathbf{W}_r = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2k+l)!} \Delta_v^k \nabla_v^l \cdot (\mathbf{v}^l v^{2k} A_{kl}(v) \mathbf{W}), \quad (33)$$

wo ∇_v bzw. Δ_v der Hamiltonsche bzw. der Laplacesche Operator in Bezug auf \mathbf{v} ist.

Die Gleichungen (28) und (33), wie auch (32) und (34) sind offensichtlich zueinander konjugiert. Die Funktion W ist also die fundamentale Lösung (die Greensche Funktion) von (33) oder von (34) bei den üblichen Grenzbedingungen. Diese Gleichungen sind der Gleichung von KRAMERS und CHANDRASEKHAR [3] ähnlich. Leider sind sie von unendlicher Ordnung in Bezug auf \mathbf{u} bzw. \mathbf{v} [9] ferner sind sie viel komplizierter.

Wir möchten noch die endgültigen Ausdrücke für $A_{kl}(u)$ im Falle wo $P(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ durch (4) gegeben ist, ableiten. Aus (30) erhalten wir

$$A_{x^{2k} z^l} = \frac{a^2 n^*}{\sqrt{\pi} c} \int w_x^{2k} w_z^l \frac{1}{w} e^{-\frac{(\mathbf{w} \cdot (\mathbf{u} + \mathbf{w}))^2}{c^2 w^2}} d\mathbf{w}.$$

Setzen wir der Kürze halber

$$u/c = s, \quad w/c = \sigma, \quad 2k + l = n$$

an und führen wir ein polares Koordinatensystem ein, dessen Achse mit \mathbf{u} zusammenfällt:

$$w_z = w \cos \theta = c\sigma \cos \theta, \quad w_x = c\sigma \sin \theta \cos \varphi$$

$$d\mathbf{w} = c^3 \sigma^2 \sin \theta d\sigma d\theta d\varphi,$$

so finden wir

$$\begin{aligned} &A_{x^{2k} z^{n-2k}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} a^2 n^* c^{n+1} \int_{\sigma=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \cos^{2k} \varphi (1 - \cos^2 \theta)^k \cos^{n-2k} \theta \sin \theta \sigma^{n+1} e^{-(\sigma + s \cos \theta)^2} d\sigma d\theta d\varphi. \end{aligned}$$

Die Integration über φ erfolgt unmittelbar :

$$A(u)_{x^{2k} z^{n-2k}} = (-1)^n a^2 n^* c^{n+1} F_n^k \left(\frac{u}{c} \right), \quad (35)$$

$$F_n^k(s) = 2\sqrt{\pi} \frac{(2k)!}{2^{2k} k!} \sum_{i=0}^k \frac{(-1)^{n+k+i}}{i! (-i)!} \int_{\sigma=0}^{\sim} \int_{\tau=-1}^1 \sigma^{n+1} \tau^{n-2i} e^{-(\sigma+s\tau)^2} d\sigma d\tau$$

$$(\tau = \cos \Theta)$$

st. Führen wir wieder eine neue Integrationsveränderliche $\varrho = \sigma + s\tau$ ein und ordnen wir die Reihenfolge der Integrationen nach ϱ und σ um, so bekommen wir

$$F_n^k(s) = 2\sqrt{\pi} \frac{(2k)!}{2^{2k} k!} \sum_{i=0}^k \frac{(-1)^{n+k+i}}{i! (k-i)!} (C_n^i(s) + (-1)^n C_n^i(-s)), \quad (36)$$

$$C_n^i(s) = \frac{1}{s^{n+1-2i}} \int_{\varrho=-s}^{\sim} \int_{\sigma=0}^{\varrho+s} \sigma^{n+1} (\varrho-\sigma)^{n-2i} e^{-\varrho^2} d\varrho d\sigma =$$

$$= \frac{1}{s^{n+1-2i}} \sum_{h=0}^{n+1} \frac{(-1)^h (n+1)!}{h! (n+1-h)!} \int_{\varrho=-s}^{\sim} \int_{\sigma=0}^{\varrho+s} (\varrho-\sigma)^{n-2i+h} \varrho^{n+1-h} e^{-\varrho^2} d\varrho d\sigma =$$

$$= \sum_{h=0}^{n-1} \frac{(-1)^h (n+1)! s^{n+1}}{h! (n+1-h)! (n+1-2i+h)} (\Phi(-s)_{2(n+1-i)} - \Phi(-s)_{n+1-h}).$$

Hier bedeutet

$$\Phi(s)_j = \frac{1}{s^j} \int_s^{\sim} z^j e^{-z^2} dz.$$

Also erhält man nach (36)

$$F_n^k(s) = 4\sqrt{\pi} \frac{(2k)!}{2^{2k} k!} \sum_{h=0}^{n+1} \sum_{i=0}^k \frac{(-1)^{n+h+k+i} (n+1)! s^{n+1}}{h! i! (n+1-h)! (k-i)! (n+1-2i+h)} \left[\psi(s)_{2(n+1-i)} - \psi(s)_{n+1-h} \right] \quad (37)$$

mit

$$\psi_j(s) = \frac{1}{2} (\Phi(-s)_j - \Phi(s)_j) = \begin{cases} \frac{1}{s^j} \int_{z=0}^s z^j e^{-z^2} dz, & \text{falls } n \text{ gerade,} \\ \frac{1}{s^j} \int_{z=s}^{\sim} z^j e^{-z^2} dz, & \text{falls } n \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (38)$$

Данные интегралы элементарны, так что формула (37) действительно дает возможность вычисления функций $F_n^k(s)$. Для первых получим

$$F_0^0(s) = F(s) = \sqrt{\pi} e^{-s^2} + \sqrt{\pi} \left(2s + \frac{1}{s} \right) \int_0^s e^{-z^2} dz, \quad (1)$$

$$F_1^0(s) = \sqrt{\pi} \left(\frac{1}{2} s + \frac{1}{4s} \right) e^{-s^2} + \sqrt{\pi} \left(s^2 + 1 - \frac{1}{4s^2} \right) \int_0^s e^{-z^2} dz, \quad (2)$$

$$F_2^0(s) = \sqrt{\pi} \left(\frac{1}{3} s^2 + \frac{7}{12} - \frac{1}{8s^2} \right) e^{-s^2} + \sqrt{\pi} \left(\frac{2}{3} s^3 + \frac{3}{2} s + \frac{1}{8s^3} \right) \int_0^s e^{-z^2} dz, \quad (3)$$

$$F_2^1(s) = \sqrt{\pi} \left(\frac{1}{12} s^2 + \frac{1}{3} + \frac{1}{16s^2} \right) e^{-s^2} + \sqrt{\pi} \left(\frac{1}{6} s^3 + \frac{3}{4} s + \frac{3}{8s} - \frac{1}{16s^3} \right) \int_0^s e^{-z^2} dz. \quad (4)$$

Мы видим, что случайная диффузия молекул газа имеет сходство с броуновским движением физически, математически же она имеет более сложную форму.

LITERATUR

1. А. Эйнштейн, М. Смолуховский, Броуновское движение (сборник статей), ОНТИ, Ленинград, 1936.
2. H. KRAMERS, Physica, **7**, 284, 1940.
3. S. CHANDRASEKHAR, Rev. Mod. Phys., **15**, 1, 1943.
4. М. А. Леонтович, Статистическая физика, Москва, 1945.
5. А. ЕУСКЕН, Lehrbuch d. chem. Phys., Bd. II, Leipzig, 1949.
6. L. M. YANG, Proc. Roy. Soc., **198**, 94, 1949.
7. Хр. Я. Христов и Н. Николов, Изв. физ. инст. БАН, **V**, 1955.
8. Н. Н. Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике, ОГИЗ, Москва - Ленинград, 1946.
9. П. П. Кузнецов, Р. Л. Стратонович, В. И. Тихонов, ЖЭТФ, **26**, 18, 1954.
10. Л. Яноши, ЖЭТФ, **26**, 386, 518, 1944.

О ДВИЖЕНИИ МОЛЕКУЛ В ГАЗЕ, I.

Хр. ХРИСТОВ

Резюме

Пусть дан газ, молекулы которого можно рассматривать как упругие шарики. Пусть будет $W(t, \mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{r} d\mathbf{v}$ вероятность того, что молекула газа, обладающая в данный момент с данной скоростью \mathbf{u} после протекания данного времени t проходит путь между \mathbf{r} и $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ с ее скоростью принимает значение между \mathbf{v} и $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$. Для функции W задаются интегральное уравнение (20), разложение в ряд (22) и дифференциальное уравнение (32) и (34).

MEASUREMENT OF THE COMPLEX DIELECTRIC CONSTANT OF LIQUIDS AT MICROWAVES USING THE EFFECT OF MULTIPLE REFLEXION

By

P. HEDVIG, L. NÉMETH and G. SCHAY

(Received 17. XI. 1955)

The interferometric effect of multiple reflexion between the layers of dielectric media causes a periodic fluctuation of the transmitted power with the probelength. The analysis of the problem shows that this effect can be used for measuring the complex dielectric constant of mediumloss liquids.

The method of measurement and the computation of the dielectric constant from the experimental data is very simple.

The measuring arrangement was the following: An OSW 2013-type reflex klystron oscillator sends a 3,3 cm microwave radiation through a vertically placed rectangular H_{01} waveguide cell. The transmitted power is detected by a DS35-type germanium crystal diode and the directed current of the crystal measured by a galvanometer of sensitivity $2 \cdot 10^{-9}$ A/o. Since the crystal current was not more than $2 \cdot 10^{-7}$ A, we can take it as a squarelaw detector.

The end of the system was well matched with an attenuator preventing the reflexions. A standing wave detector serves as a control for the match. Between the klystron and the cell was another attenuator for minimising the reflexions between the sonde of the klystron and the upper layer of the liquid dielectricum. The waveguide cell was closed with a thin mica window.

Fig. 1 shows the measured curve for toluene at 22° C. As can be seen, the transmitted intensity changes periodically with the length of the layer. From the measured intensity ratios $A = I_2/I_1$ and $B = I_2/I_3$ (see Fig. 1), we can compute the dielectric constant and loss in the following way:

$$\varepsilon = \left(\frac{\lambda}{2b} \right)^2 + \left(\frac{\lambda}{2\Delta d} \right)^2 - \left(\frac{\lambda \log x}{\pi \Delta d} \right)^2,$$

$$\operatorname{tg} \delta = - \frac{\log x}{\pi \varepsilon} \left(\frac{\lambda}{\Delta d} \right)^2.$$

Here λ is the free-space wavelength in cm, b the broader cross-dimension of the waveguide cell in cm; Δd the length in cm between the observed two maxima of the curve. For x we have

$$x = \sqrt{\left(\frac{B-A}{2}\right)^2 + 1} - \frac{B-A}{2} \approx 1 - \frac{B-A}{2}$$

with $B = I_2/I_1$, $A = I_2/I_3$ (see the Figure).

We made five parallel measurements for toluene at 22° C, 3 and 3,2 wavelength. The results are: $\varepsilon = 2,39 \pm 0,022$, $\text{tg}\delta = 2,000 \cdot 10^{-2} \pm 0,034 \cdot 10$. For a 10% mixture of benzene and ethylalcohol we have $\text{tg}\delta = 8,00 \cdot 10$. The multiple reflexion interference patterns were still observable. For dielectrics

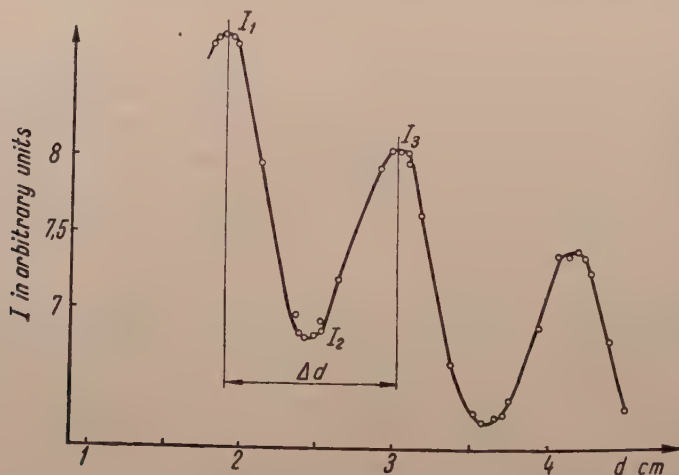


Fig. 1

of higher loss [$\text{tg}\delta > 0,1$] the measurement cannot be made in transmission. In that case the effect of multiple reflexion becomes very weak and hard to detect.

The analysis of the probable error shows that for the higher loss dielectrics the error increases rapidly both in ε and $\text{tg}\delta$. For very low loss dielectrics the error in ε decreases and in $\text{tg}\delta$ increases. We think that in the $\text{tg}\delta = 10^{-1} - 10^{-2}$ region the method is well applicable, and the probable error is not much more than 1% for ε and 2% for $\text{tg}\delta$.

We wish to express our thanks to Dr. P. FARAGÓ for his helpful interest in our work.

BEMERKUNG ZUM NACKEN-KYROPOULOSSCHEN KRISTALLZÜCHTUNGSVERFAHREN

Von

I. TARJÁN und GY. TURCHÁNYI

INSTITUT FÜR PHYSIK DER MEDIZINISCHEN UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Eingegangen : 24. I. 1956)

A. W. SCHUBNIKOW [1] und später A. NEUHAUS und G. NITSCHMANN [2] befassen sich eingehend mit dem NACKEN-KYROPOULOSSCHEN Kristallzüchtungsverfahren und geben eine Erklärung für die Ausbildung der verschiedenen Wachstumsformen. Ihre Untersuchungen weisen auf die wesentliche Rolle hin, die die in der Apparatur herrschende Temperaturverteilung bei der Ausbildung der verschiedenen Wachstumsformen spielt. Wird nämlich der Keimkristall stark abgekühlt, so dass die Schmelzpunktsisotherme entfernt vom wachsenden Kristall in der Schmelze verläuft, so erhält man eine polyedrische Form, während bei nur schwacher Abkühlung der Verlauf der Schmelzpunktsisotherme die Form des Kristalls bestimmt und so kugelförmige, zylindrische usw. Kristalle entstehen. Nach einer anderen Arbeit von A. W. SCHUBNIKOW und M. P. SCHASSKOLSKAJA [3] gestaltet sich die stabilste polyedrische Gleichgewichtsform dann aus, wenn Schmelzen und Wachstum bei geringfügigem, langsamem Ansteigen und Abfallen der Temperatur der den Kristall umgebenden Schmelze (bzw. Lösung) vor sich gehen.

Es sei nun hier über eine interessante Beobachtung berichtet, die als Ergänzung zu den obenerwähnten Untersuchungen dienen mag. Bei der Züchtung von Alkalihalogenidkristallen mit dem KYROPOULOS-Verfahren wurde die Erfahrung gemacht, dass sich in gewissen Fällen anstatt eines zylindrischen Kristalls ein der Orientation des Keimkristalls entsprechender polyedrischer Kristall ausbildete. Dies kam in sämtlichen Fällen vor, wo sich die Schmelze aus irgendeinem Grunde nicht im Ruhezustand befand, sondern sich wellenartig um den wachsenden Kristall hin und her bewegte. Die Abb. 1 zeigt eine Aufnahme von einem NaCl-Kristall, bei dessen Züchtung die Schmelze mit Hilfe eines einfachen Mechanismus zeitweise geschüttelt und dann wieder im Ruhezustand gelassen wurde. In der Abbildung bezeichnet *a* den Keimkristall, *b* und *d* sind zylindrische Teile, die aus der ruhenden Schmelze gewachsen waren, während sich der prismenartige Teil *c* aus der »welligen« Schmelze entwickelt hatte. Es handelt sich im gegenwärtigen Fall um ähnliche Verhältnisse wie in den erwähnten Untersuchungen von A. W. SCHUBNIKOW und M. P. SCHASSKOLSKAJA, als sie die stabilste Gleichgewichtsform des Kristalls ausgestalteten.

In der welligen Schmelze wird nämlich der Kristall von einer Flüssigkeit mit bald höherer, bald niedrigerer Temperatur umspült, wodurch abwechselnd ein Schmelzen und dann wieder ein Wachsen hervorgerufen wird. Gleichzeitig stört das Schütteln die ordnungsgemässe Ausbildung der Isotherme, so dass unter solchen Umständen die zwischen den einzelnen Besetzungspunkten bestehenden Energiedifferenzen und nicht die von der Isotherme umschlossene Grundfläche die Form des Kristalls bestimmen.



Abb. 1

Ähnliche Beobachtungen konnten auch im Zusammenhang mit der Form der unteren Kristallflächen gemacht werden. Solange der Ofen eine höhere Temperatur aufwies, besonders bei Öfen mit Bodenheizung, bildete sich je nach der Isothermenfläche eine konvexe oder ebene Unterfläche aus. Wenn jedoch die Temperatur des Ofens gesenkt wurde und sich die mehrere Millimeter dicke Schmelze unterhalb des Kristalls am Schmelzpunkt befand, ergab sich eine polyedrische Form, deren Flächen eine den Keimkristallflächen parallele Anordnung zeigten.

LITERATUR

1. A. В. Шубников siehe: В. Д. Кузнецов, Кристаллы и кристаллизация, S. 214. Москва, 1954.
2. A. NEUHAUS und G. NITSCHMANN, Zs. f. Elektrochemie, **56**, 483, 1952.
3. A. В. Шубников, М. П. Шаскольская siehe: В. Д. Кузнецов, Кристаллы и кристаллизация, S. 209. Москва, 1954.

THE FREQUENCY DEPENDENCE OF THE PERMEABILITY OF MAGNETITE BETWEEN 1000 AND 3000 MHz

By

I. NAGY, D. PALLAGI and L. PÁL

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE OF PHYSICS, BUDAPEST

(Received 26. XI. 1955)

The frequency dependence of the complex permeability of magnetite powder consisting of grains of sizes under 10μ and mixed with paraffin was investigated between 1000 and 3000 MHz for various concentrations of magnetite [1]. It is well known [2] that the wave impedance and propagation constant of a coaxial transmission line filled with a medium of permeability $\mu = \mu_1 - j\mu_2$ and dielectric constant $\varepsilon = \varepsilon_1 - j\varepsilon_2$ may be expressed in terms of the above constants as

$$Z = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \quad \text{and} \quad \gamma = j \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{\mu\varepsilon},$$

where λ_0 denotes the wave length in vacuum. It is thus evident that determination of ε and μ can be reduced to the measurement of the quantities Z and γ . These can be determined from the input impedance of the filled coaxial line for short circuited and open circuited conditions [3]. To this end, a standing wave meter with plan parallel outer conductor (FMV, type TX 13) was used, mainly because its reflexion and equivalent gap are much smaller than in the conventional slotted coaxial line [4]. This wave meter was coupled at one end to the signal generator across an attenuator of 12 decibels, at the other end to a variable short circuit following a double tuner and the wave guide containing the sample. As an indicator a light spot galvanometer (KFKI, type U/FTPA) of 50 Ohm resistance and 0,3 microamperes total deviation was used. In order to obtain reproducible results, the wave meter and the coaxial wave guide for accomodation of the sample (without the sample itself) were carefully matched for each wave length. (In this way the intrinsic standing wave ratio of the wave meter was reduced below 1,05.) The quality of the variable short circuit and the characteristics of the crystal diode were likewise carefully checked.

The specimens to be examined were prepared from a mixture of paraffin and magnetite powder of grain sizes under 10μ in accurately determined proportions. The magnetite powder was added to the molten paraffin and stirred to incipient solidification, whereby the magnetite grains were practically prevent-

ed from sedimentation. Although in this manner the homogeneity of the mixture appeared to be secured, it was nonetheless carefully controlled. For the measurement itself, it is an essential condition that within the desired length the material should completely and uniformly fill the coaxial wave guide and that its base be precisely at right angles to the coaxial wave guide axis. The samples were stamped to exact dimensions at 40 to 50° C.

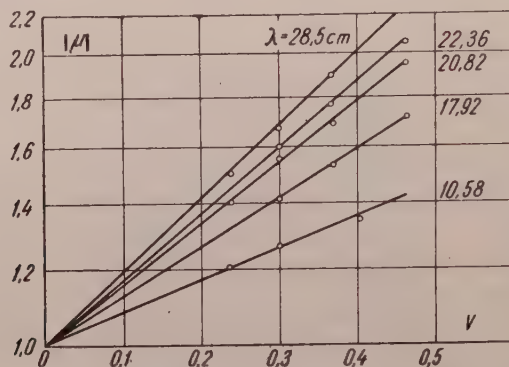


Fig. 1. Determination of the permeability of magnetite according to LICHTENECKER's formula

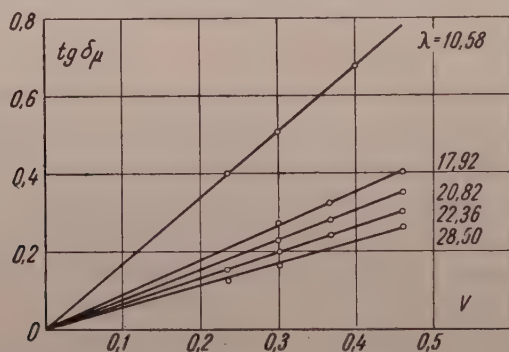


Fig. 2. Determination of the loss angle of magnetite according to LICHTENECKER's formula. (Theory gives $\delta_\mu = v\delta_\mu^{(a)}$ instead of $\text{tg } \delta_\mu = v \text{tg } \delta_\mu^{(a)}$, but for small values of δ_μ the latter expression, according to BIRKS [3] can be used.)

For the evaluation of the measured data, the dielectric constant and loss angle of paraffin is needed. Our own measurements gave 2.18 for the former and less than 10^{-4} for the tangent of the loss angle.

Although there are some references to the marked dependence of the accuracy of the results on the length of the specimen employed, the literature fails to furnish reassuring guidance for the selection of the most favourable conditions. Even in one of the easiest cases, the determination of the dielectric constant of paraffin, the use of samples of various lengths leads to a marked

discrepancy in the results. One of the reasons for this discrepancy is that the length of the sample and the shift of minimum caused by the sample together give a value which corresponds to a value on the steep part of the tangent curve. Therefore, even the smallest inaccuracy in the determination of the sample length or of the minimum shift is likely to cause a serious error. Another reason might be that the base of the sample is not perpendicular to the wave guide axis. The unevenness of the base surface may likewise be responsible for errors. We have, therefore, worked out a method which permits an easy deter-

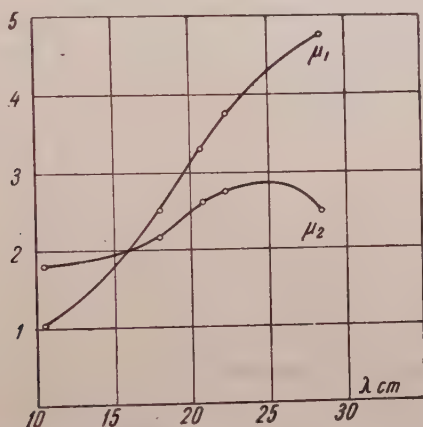


Fig. 3. The dependence of the permeability of magnetite on wavelength

mination of the most favourable sample length. With this method, the error of our measurements of μ and ε was not more than 3%.

Our measurements were performed with samples of varying concentrations at wave lengths 10,58 ; 17,92 ; 20,82 ; 22,36 and 28,50 cm. Fig. 1 shows the absolute value of the permeability of magnetite as a function of the volume concentration. The permeability of pure magnetite was calculated by extrapolating the value of $|\mu|$ to $v = 1$. Fig. 2 shows $\text{tg } \delta_\mu$ as a function of the volume concentration. Both diagrams indicate that the linear dependence on concentration, as postulated by LICHTENECKER [6], is satisfied. With increasing magnetite concentration the grains can be regarded as less and less independent of one another, wherefore it is probable that our extrapolation until $v = 1$ is not valid. Fig. 3 shows the real and imaginary part of the permeability plotted against the wave length. The real part (μ_1) shows a marked drop between 20 and 10 cm, and at 10 cm is only slightly above unity. The imaginary part (μ_2) shows a maximum around 25 cm. On the strength of the curves in Fig. 3, one might feel inclined to explain the decrease in permeability by a purely relaxative mechanism (e. g., shifts of domain walls, etc.), yet the wave length dependence

of μ_1 and μ_2 in the presence of a constant magnetic field seems to indicate that the most important role is played by rotation processes. Our results agree with previous determinations [3].

REFERENCES

1. I. NAGY, D. PALLAGI and L. PÁL, Magyar Fizikai Folyóirat (Hungarian Journal of Physics in Hungarian), **4**, 359, 1956.
2. J. C. SLATER, Microwave Transmission, McGraw Hill, New York, 1942.
3. J. B. BIRKS, Proc. Phys. Soc., **60**, 282, 1948 ; **63**, 65, 1950.
4. И. Н. КОЛЛИ, К. М. ПОЛИВАНОВ, Изв. АН. сер. физ. **18**, 382, 1954.
4. W. B. WHOLEY, W. N. ELDERED, Proc. I. R. E., **38**, 244, 1950.
5. C. G. MONTGOMERY, Technique of Microwave Measurements, McGraw Hill, New York, 1947.
5. H. M. BARLOW, A. L. CULLEN, Microwave Measurements Constable Co., London, 1950.
6. K. LICHTENECKER, Phys. Z., **19**, 374, 1918.

POSSIBLE CORRECTION OF THE SEMI-EMPIRICAL MASS FORMULA

By

G. SZAMOSI and M. A. ZIEGLER

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS, BUDAPEST

(Received 17. IV. 1956)

As is well known the semi-empirical formula of the binding energy of a nucleus [1] is very suitable for the theoretical investigation of numerous nuclear properties. This fact suggests that the formula — although the exact theoretical determination of the constants contained in it is still lacking — fits the empirical data, i. e. the total binding energy of the nucleus is indeed represented by the terms of the formula, the ratio of the individual terms being in accordance with experience.

The nuclear energy is given by

$$E = -a_1 A + a_2 A^{2/3} + a_3 \frac{n^2}{A} + a_5 \frac{Z^2}{A^{1/3}} + \delta, \quad (1)$$

where $n = A - 2Z$, δ stands for the pairing energy and the a 's are adjustable constants.

One possible set of the constants was proposed by FERMI in 1950 [2]. a_5 was evaluated by using the energy differences of mirror nuclides for which we get from (1):

$$\Delta E = a_5 A^{2/3}. \quad (2)$$

This leads to $a_5 = 0,58$ MeV, which corresponds to a Coulomb radius constant $r_p = 1,4 \cdot 10^{-13}$ cm on the assumption that the charge on the nucleus is uniform within a sphere of radius R_p .

However, recent studies of the electron scattering and of mesonic atoms indicate a Coulomb radius constant of $1,2 \cdot 10^{-13}$ cm. The value of a_5 corresponding to this result is 0,7 MeV, which is much greater than the older value and thus, of course, does not fit the experimental data of mirror nuclides. This change of the Coulomb energy naturally involves a change in the numerical values of the other constants too. The results pertaining here are summed up in the book of A. S. GREEN [3].

In this paper we attempt to overcome the difficulty described above. Since the nuclear radius obtained from neutron scattering experiments is

$R_n = 1,4 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$ cm and the radius of the charge distribution is $R_p = 1,2 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$ cm the volume occupied by the protons is smaller than that of the neutrons, i. e. the average kinetic energy of the protons turns out to be greater than that of the neutrons. We may take this fact very simply into account by using the usual method of Fermi statistics for estimating the kinetic energy. The total kinetic energy of the nucleons is

$$T = \kappa \frac{N^{5/3}}{R_n^2} + \kappa \frac{Z^{5/3}}{R_p^2},$$

where κ is constant.

Developing T , as usual, in powers of $\frac{n}{A}$, we obtain

$$T = \kappa \left[(1 + \gamma) A + \frac{5}{3} (1 - \gamma) n + \frac{5}{9} (1 + \gamma) \frac{n^2}{A} \right],$$

where $\gamma = \left(\frac{R_n}{R_p} \right)^2$, without reference to the mass difference of protons and neutrons. (Otherwise $\gamma = \frac{m_n}{m_p} \left(\frac{R_n}{R_p} \right)^2$.)

Consequently, a term proportional to n must appear also in the semiempirical formula, i. e. the complete form of formula (1) becomes:

$$E = -a_1 A + a_2 A^{2/3} + a_3 \frac{n^2}{A} + a_4 n + a_5 \frac{Z^2}{A^{1/3}} + \delta. \quad (1')$$

For the energy differences of mirror nuclides we get from (1'):

$$\Delta E = -2a_4 + a_5 A^{2/3}. \quad (2')$$

Using the values of a_5 ($\sim 0,7$ MeV) corresponding to the proton radius given above, a_4 may be determined very simply by adjusting (2') to the experimental data: To determine a_1 , a_2 and a_3 we have used the procedure of Fermi and the results are:

$$E^{MeV} = -15,6A + 17,1A^{2/3} + 21,2 \frac{n^2}{A} + 0,6n + 0,72 \frac{Z^2}{A^{1/3}} + \delta. \quad (1'')$$

Expression (1'') fits the experimental values of the binding energy of nuclei and the line of beta stability over the entire range of A . It should be noted that the value of surface tension considerably exceeds its former value.

Further questions in connection with the determination of the constants will be discussed later.

REFERENCES

1. H. A. BETHE and R. F. BACHER, Rev. Mod. Phys., **8**, 165, 1936.
2. E. FERMI, Nuclear Physics, Chicago University Press, 1950.
3. A. S. GREEN, Nuclear Physics, McGraw-Hill, London, 1955.

B. KOCKEL:

Darstellungstheoretische Behandlung einfacher wellenmechanischer Probleme

B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1955. 231 Seiten, 28 Abbildungen und VI Tafeln.

Die quantenmechanische Behandlung von Atomen mit mehreren Elektronen, Molekülen und Kristallen ist mit grossen mathematischen Schwierigkeiten verbunden. Die Lösung ihrer Schrödingergleichungen, d.h. das Auffinden ihrer Eigenfunktionen und Eigenwerte ist nur mit Hilfe von Näherungsverfahren möglich. Bei Heranziehung der Gruppentheorie und insbesondere der Darstellungstheorie lässt sich eine Antwort auf zahlreiche Fragen erhalten, ohne die Lösung der Schrödingergleichung auffinden zu müssen. Solche Fragen sind: Symmetrieeigenschaften der Eigenfunktionen, Auswahlregeln, Term aufspaltung infolge der Wirkung einer äusseren Störung usw.

Während es jedoch in der einschlägigen Literatur zahlreiche gute Bücher gibt, die die Gruppentheorie in rein mathematischer Hinsicht behandeln (z. B. die Werke von SPEISER, MURNAGHAN, LITTLEWOOD und BOERNER), ist die Anzahl jener Bücher sehr gering, die sich mit quantenmechanischen Problemen auf gruppentheoretischer Grundlage befassen. Es genügt hier, auf die bekannten Bücher von WEYL, VAN DER WAERDEN und WIGNER hinzuweisen.

Um so erfreulicher ist es nun, dass diese spezielle Fachliteratur nach der langen Zeit, die seit der Herausgabe der erwähnten drei ausgezeichneten, aber ziemlich gedrungen und schwer verständlich geschriebenen Werke verstrichen ist, durch das Buch von KOCKEL um ein weiteres Werk bereichert wurde.

KOCKEL setzte sich — wie er im Vorwort seines Buches ausführt — das Ziel, durch die eingehende, mit vielen Beispielen durchsetzte Behandlung einzelner Fragen die Abneigung gegen die besonderen algebraischen Methoden der Gruppentheorie zu überwinden und so durch eine gründliche Übersicht eines verhältnismässig engen Gebietes eine sichere Basis zu schaffen für weitere Untersuchungen, in erster Linie zum völligen Verständnis des Buches von VAN DER WAERDEN.

Das Buch beschränkt sich auf die gruppentheoretische Behandlung der mit den Symmetrieeigenschaften von Atomen und Ionen zusammenhängenden Fragen und geht weder auf die Lorentzsche Gruppe noch auf die Diracsche Gleichung, noch auf die Molekülspektren ein. Es setzt verhältnismässig wenig Kenntnisse voraus und führt die notwendigen Begriffe im Laufe der Darlegungen in harmonischer Weise ein.

Das Buch von KOCKEL lässt sich inhaltlich in drei Hauptteile gliedern. Im ersten Teil, der aus den Kapiteln I und II besteht, werden die mit der Schrödingergleichung zusammenhängenden Grundkenntnisse des Mehrkörperproblems der nichtrelativistischen Wellenmechanik zusammengefasst.

Im I. Kapitel beschäftigt sich der Verfasser mit der Schrödingergleichung eines $(N + 1)$ -Teilchensystems sowie mit der Ausstrahlung und dem Drehimpuls eines solchen Systems.

Das II. Kapitel enthält die Lösung der Schrödingergleichung für einige einfache Fälle (Kasten-, Oszillator- und Coulombpotential) sowie die Untersuchung der allgemeinen Eigenschaften der Eigenfunktionen.

Im zweiten Teil des Buches, in den Kapiteln III—VII, werden die gruppentheoretischen Begriffe erörtert, deren Kenntnis für die späteren Anwendungen notwendig ist. In diesem Rahmen wird der sowohl für die verschiedenen Gruppen als auch für die physikalischen Anwendungen wichtigste Begriff, die Darstellung der Gruppen, an Hand eines so reichhaltigen Beispielmateri als erörtert, dass dies als besonderes Verdienst des Buches zu erwähnen ist, obwohl von den rein mathematischen Begriffen der Gruppentheorie nur so viele aufgearbeitet werden, wie für die späteren physikalischen Anwendungen unbedingt notwendig ist.

Im III. Kapitel gibt der Verfasser die Definition der Gruppen, führt die notwendigen Grundbegriffe ein und erläutert sie an Hand zahlreicher Beispiele.

Das IV. Kapitel bringt die Definition der Darstellungen, die durch zahlreiche Beispiele eingeübt werden.

Im V. Kapitel werden die Grundbegriffe des Rechnens mit Matrizen, die Transformationen in Diagonalmatrizen und die Reduktion behandelt.

Im VI. Kapitel befasst sich der Verfasser mit den linearen Transformationen und dem Zusammenhang zwischen diesen und den Matrizen.

Die Theorie der linearen Transformationen wird absichtlich nicht für Vektorräume unendlicher Dimensionszahl aufgestellt, sondern — um den Lesern das Gefühl zu geben, sie befinden sich auf physikalisch vertrautem Gelände — mit linear unabhängigen und orthonormalisierten Eigenfunktionen gearbeitet, die einem entarteten Energieeigenwert eines Atoms oder Ions mit N Elektronen zugeordnet sind. Durch diese geschickte Interpretation wurden die mathematischen Begriffe der Gruppentheorie tatsächlich mehr der physikalischen Überlegung angepasst, wobei allerdings die Ausdehnung auf die abstrakte Erörterungsweise der Quantenmechanik eine Erschwerung erfährt.

Das VII. Kapitel enthält die eindeutige Darstellung der Drehgruppe des dreidimensionalen Raumes, die Besprechung der Matrizen der infinitesimalen Drehungen und der Reduktion einer beliebigen Darstellung der Drehgruppe.

Im dritten Teil des Buches, in den Kapiteln VIII—XIII, werden mehrere physikalische Anwendungen der Gruppentheorie eingehend behandelt.

Im VIII. Kapitel beschäftigt sich der Verfasser auf Grund der vorhergehenden Ausführungen mit dem Vektormodell der Elektronenhülle des Atoms und mit der Bestimmung der Auswahlregeln.

Im IX. Kapitel wird die operatorhomomorphe Abbildung erörtert, die beim gleichzeitigen Vorhandensein mehrerer, miteinander vertauschbarer Gruppen von Transformationen notwendig ist. Da dieser Begriff am wenigsten anschaulich ist, wird besondere Sorgfalt auf seine mehrseitige Erörterung verwendet.

Im X. Kapitel wird der Spin eingeführt. Es werden hierbei die experimentellen Grundlagen angegeben und die Transformationen der Spinfunktionen besprochen.

Im XI. Kapitel findet sich die Erörterung der nicht-eindeutigen Darstellungen der Drehgruppe, die dann notwendig sind, wenn man auch den (halbzahligen) Elektronenspin berücksichtigt.

Im XII. Kapitel beschäftigt sich der Verfasser mit dem Pauliprinzip, dessen Aufstellung durch die spektroskopischen Erfahrungen notwendig wurde. Er folgt hierbei den Gedankengängen von VAN DER WAERDEN und befasst sich infolgedessen nicht mit der Reduktion der Darstellung der Permutationsgruppe (was zwar eine schon vor längerer Zeit ausgearbeitete, aber sehr umständliche Aufgabe ist), sondern benutzt die anschaulichere, von SLATER in Determinantenform angegebene Wellenfunktion.

Das XIII. Kapitel bringt eine Behandlung des Zeemaneffekts auf Grund der Darstellungstheorie.

Den Abschluss des Buches bildet ein kurzer Anhang, in dem einige mathematische Einzelheiten beleuchtet werden.

In richtiger Weise, mit einer das Verständnis erleichternden Didaktik wird hierbei der induktive Weg gewählt und von den einfacheren zu den verwickelteren Problemen fortgeschritten. Vor einzelnen neuen, schwierigeren Teilen wird in der Regel die Lösung des vorhergehenden einfacheren Problems zusammengefasst. Bei jeder einzelnen Anwendung tritt die physikalische Anschauungsweise gegenüber dem mathematischen Formalismus in den Vordergrund.

Die Hauptaufgabe des Buches besteht in der Erklärung der Struktur der Atomspektren in der Bestimmung der Multiplizität der Terme aus den Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktionen. Dementsprechend wird das Buch insbesondere für jene Physiker ein sehr nützliches Hilfsmittel darstellen, die sich mit der Spektroskopie beschäftigen.

Leider werden im Buche weder Moleküle noch Kristalle behandelt, obgleich dies die Einführung von nur wenigen neuen Begriffen (Punktgruppe, Klassen, Charaktere) notwendig machen und die Erörterung nicht erschweren würde; allerdings wäre in diesem Falle eine Erweiterung des Umfangs des Buches unvermeidlich.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass das Buch KOCKELS ein klar geschriebenes, auf seinem Fachgebiet längst erwartetes, eine fühlbare Lücke schliessendes Werk ist, das von den Interessierten gewiss freudig begrüßt werden wird.

P. CSAVINSZKY und E. KAPU

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki felelős: Farkas Sándor

A kézirat nyomdába érkezett: 1956. V. 29. — Terjedelem: 16,25 (A/5) ív, 52 ábra

39772/56 — Akadémiai Nyomda, V., Gerlőczy u. 2. — Felelős vezető: Puskás Ferenc

DARK-FIELD MICROSCOPIC ILLUMINATION FOR ENERGY MEASUREMENTS OF FAST NEUTRONS WITH PHOTOGRAPHIC EMULSIONS

By

L. MEDVECZKY and E. BUJDOSÓ

NUCLEAR RESEARCH INSTITUTE OF THE HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES, DEBRECEN

(Presented by A. Szalay. — Received 26. I. 1956)

By applying an azimuth diaphragm to the aperture iris of a bright-field condenser and thus producing dark-field illumination we succeeded in rendering a great emulsion volume readily visible, so that only tracks of $\pm 25^\circ$ azimuthal angle interval might be observable, that is about 6—30% of all the existing tracks.

In case of low neutron intensity, this method facilitates to a great extent the scanning of tracks in the emulsion as well as their measurement.

In our Institute we have made energy measurements with photographic emulsions on fast neutrons originating from nuclear processes induced by alpha rays of polonium in light elements. The use of a Po- α source [1] of 3 mm diameter enabled a good geometry of observation even at a short irradiation distance (40 mm). The neutron flux was very slight, because of the small energy cross section of the nuclear processes and on account of the small intensity of the preparation (10—12 millicuries). For this reason the evaluation or examination of the emulsions, as well as the measurement of an adequate number of tracks, has proved a tedious task. The aim of this study was to facilitate and accelerate energy measurements on fast neutrons with photographic emulsions in the case of just such slight neutron fluxes.

The longer part of the procedure was to scan the tracks to be measured and to select them according to their direction because only tracks within a maximum angle of $\pm 15^\circ$ to the direction of the neutrons were to be taken into consideration. Consequently, some method had to be found, which would enlarge the readily visible volume of the emulsion for the tracks of desired direction which would possibly also exclude, prior to observation, all the tracks of undesired direction.

For microscopic observation of the tracks a dark-field illumination can also be used. If the illumination is produced in the usual way by a dark-field condenser, a substantially lower magnification would be ineffectual, because of the diffraction of light on the background grains of the emulsion. With the method described by E. H. LAND and collaborators [2] it is possible to use lower magnification, so that at the same time the glitter of the background also diminishes. The requirement for the selection of angle can be fulfilled by illumination of the tracks perpendicular to their direction. This can be accomplished by

inserting a suitable azimuth diaphragm in the plane of the aperture of the condenser (Fig. 1).

For these investigations a C. Zeiss research microscope was used with $84\times$ magnification (objective $8\times$ achr. N. A. 0,20, ocular $7\times$ H) with binocular tubes and Abbe condenser. The solid angle within which the tracks visible is determined by the aperture of the objective and the illumination,

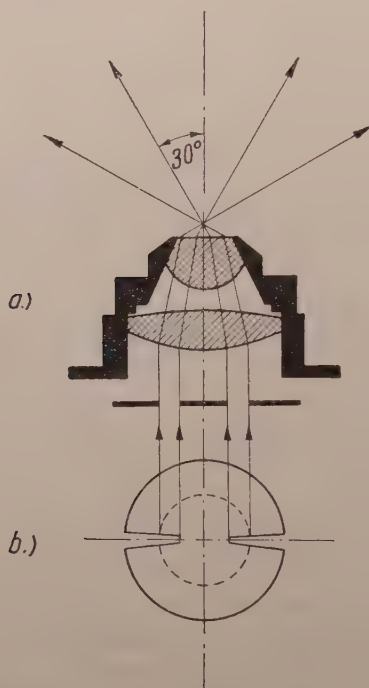


Fig. 1a. Section of condenser and schematic passage of the beam. b. Shape of the azimuth diaphragm. (The dotted line represents the iris diaphragm of the condenser)

by the interior diameter of the azimuth diaphragm. The most favourable illumination was obtained by the application of an azimuth diaphragm of 8° aperture and 10 mm interior diameter. The exterior diameter of the azimuth diaphragm depends on the variable iris diaphragm of the condenser. By changing the diameter of the iris diaphragm the glitter of the background can be diminished.

At the above-described illumination, according to our measurements the beam leaving the condenser declined from the axis in an angle between 30° and 60° . At this illumination even such a low magnification proved sufficient for the detection of 10–20 micron long tracks and only those tracks remained visible, which were lying inside the angle interval $\pm 25^\circ$ to the direction outlined by the adjustment of the azimuth diaphragm. Their number

mounted to about 28—30% of all the incident tracks. At the same time, the readily visible volume also increased 30—40 times relative to the 200—300 \times magnification (that is the minimum to be used by a bright-field illumination) consi-

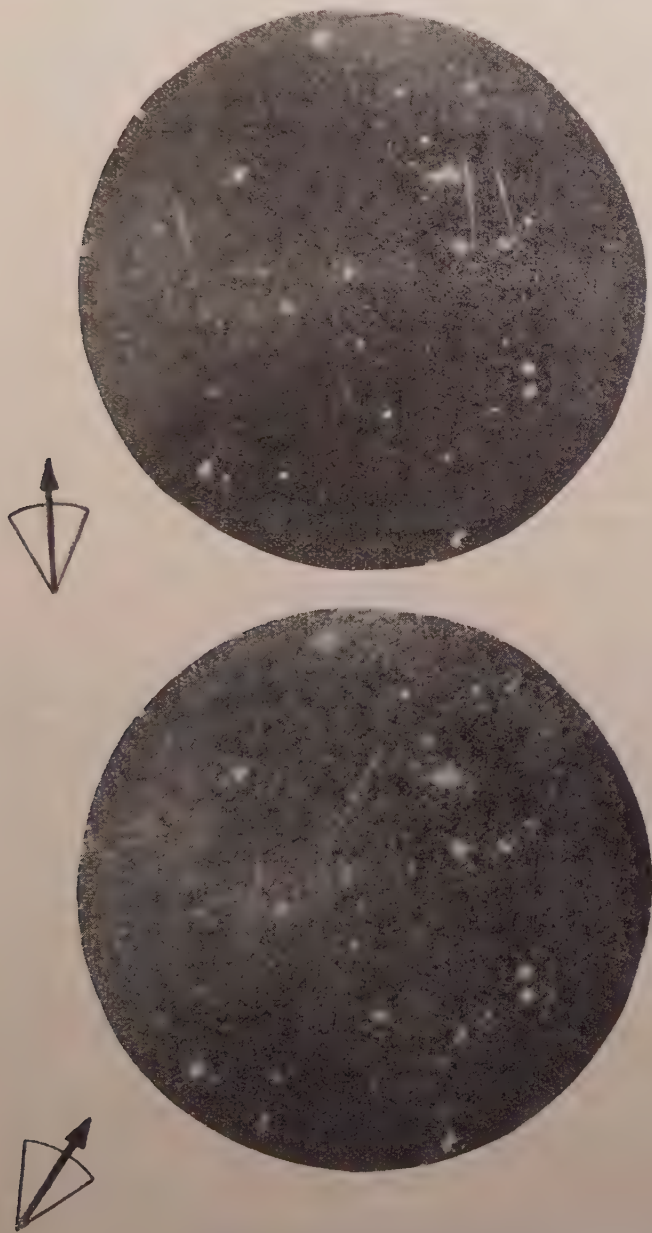


Fig. 2. Photomicrographs made with the described illumination from an emulsion irradiated by fast neutrons. The paths are recoil proton tracks. The arrows alongside the tracks designate the direction indicated from the point of view of visibility, they illustrate also the angle area

dering that the diameter of the field of view at the aforesaid illumination is 1100 microns, while the depth of focus was 25 microns.

On the basis of wave optics [3] the angle interval of the visibility of tracks computed by the above data of the optics and azimuth diaphragm in a most unfavourable beam (30°) direction, will yield $\pm 23^\circ 35'$ [4].

For demonstration of the above statement two photomicrographs are shown in Fig. 2. Both were made from the same field of an Ilford C2 emulsion 100 microns thick — as can easily be seen from the silver grains — they were, however, taken with azimuth diaphragms of different directions.

We are greatly indebted to Professor A. SZALAY for the interest he has shown in our work.

REFERENCES

1. A. SZALAY, Zs. f. Phys., **112**, 29, 1938.
2. E. H. LAND, G. BIRD and W. A. SHURCLIFF, Journ. of Opt. Soc. Am., **40**, 61, 1950.
3. H. SIEDENTOPF, Zs. f. wiss. Mikrosk., **29**, 14, 1912.
4. L. MEDVECZKY, E. BUJDOSÓ, Magyar Fizikai Folyóirat, **3**, 129, 1955.

ОСВЕЩЕНИЕ МИКРОСКОПА С ТЕМНЫМ ПОЛЕМ ЗРЕНИЯ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ЭНЕРГИИ БЫСТРЫХ НЕЙТРОНОВ ПРИ ПОМОЩИ ФОТОЭМУЛЬСИИ

Л. МЕДВЕЦКИ и Э. БУЙДОШО

Резюме

Азимутная диафрагма помещалась в диафрагме конденсора со светлым полем зрения. Таким освещением темного поля зрения удалось достичь того, что при малом увеличении был виден большой объем эмульсии, и среди всех проекторий можно наблюдать только те, которые имеют азимутальный угол $\pm 25^\circ$, т. е. только примерно 28—30% всех траекторий. Этот метод облегчает обнаружение траекторий в эмульсии в случае малой интенсивности измерения и тем самым облегчает измерения.

INNERE ARBEIT IN DER RELATIVISTISCHEN DYNAMIK*

Von

G. MARX

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER ROLAND-EÖTVÖS-UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Vorgelegt von K. F. Novobátzky. — Eingegangen: 24. II. 1956)

In der vorliegenden Arbeit wird die relativistische Dynamik des Massenpunktes in jenem gemeinen Fall behandelt, wo die vier Kraftkomponenten unabhängig voneinander sind. In diesem Fall vermag die Kraftwirkung die Energie des Massenpunktes auf zweierlei Weise zu erhöhen: entweder durch Geschwindigkeitszunahme (kinetische Arbeit) oder durch Zunahme der Ruhemasse (innere Arbeit). Im elektromagnetischen Feld tritt nur die erstere auf, hierbei kommt es zur Erscheinung der »relativistischen Massenvergrößerung«. Im skalaren Feld und in anderen Fällen beeinflusst die innere Arbeit den Verlauf der Bewegung in bedeutender Weise, es kann die Massenvergrößerung ausbleiben und an ihrer Stelle die Erscheinung der »relativistischen Abstoßung« bzw. das Überschreiten der Lichtgeschwindigkeit eintreten. An Hand der vorgeführten Beispiele werden auch die neuartigen Energieverhältnisse untersucht. Die Verwendung des allgemeinen Kraftausdruckes ermöglicht eine einfache Herleitung der invarianten Variationsprinzipien.

1. Die Veränderung der Ruhmasse. Innere Arbeit

Zur Zeit der Ausarbeitung der Theorie der relativistischen Mechanik standen vor allem die mechanischen Gesetze der Bewegung von schnellen Elektronen im Mittelpunkt des Interesses. Eine der als erste zu lösenden Aufgaben war, die aus drei Komponenten bestehende Newtonsche Kraft zu einem Vierervektor (zur Minkowskischen Kraft F_i) zu ergänzen. Die Bestimmung der vierten Kraftkomponente konnte im Falle der Lorentzschen Kraft ohne Schwierigkeiten erfolgen. Die Kovarianzgesetze des elektromagnetischen Feldes lieferten nämlich vier solche Kraftkomponenten, die zur Konstanz des Wertes der Ruhmasse führten. Dieses Ergebnis, die Konstanz der Ruhmasse, wurde nun als grundlegende Annahme zur Bestimmung der vierten Kraftkomponente auch anderswo anerkannt. Auf diese Weise wurde die ganze relativistische Dynamik ausgearbeitet.

In den letzten Jahrzehnten lenkten dann die Forschungen über die Struktur der Atomkerne und der Elementarteilchen die Aufmerksamkeit auch auf Krafttypen, die von den Lorentzschen Kräften wesentlich abweichende Eigenschaften aufwiesen. Es wurde offenkundig, dass der auf die Lorentzsche Kraft

*Über die wichtigeren Ergebnisse dieser Arbeit berichtete der Verfasser anlässlich eines Relativitätstheoretischen Kolloquiums in Dobogókő (Ungarn) am 14. April 1955. Vgl. Fizikai Híradék, 5, 117, 1955 (ungarisch).

zugeschnittene Rahmen der relativistischen Dynamik zu eng war. (An Hand von Beispielen aus der Literatur liesse sich nachweisen, dass dies des öftern zur Quelle von Schwierigkeiten wurde.) In der Mechanik des Massenpunktes ist eine Weiterentwicklung der Theorie wünschenswert, die vom Axiom der Konstanz der Ruhmasse abgeht und so allgemeinere Formen der Wechselwirkung zwischen Feld und Teilchen gestattet. Sozusagen gleichzeitig sei in mehreren Richtungen solche Bestrebungen ein, in erster Linie im Zusammenhang mit der klassischen feldtheoretischen Untersuchung der Bewegungsgleichungen.

Die vorliegende Arbeit setzt sich zum Ziel, einen allgemeineren Kraftbegriff als es die Lorentzsche Kraft ist, zu untersuchen, wobei von der Mechanik des Massenpunktes ausgegangen werden soll. Besonderes Gewicht sei auf die Untersuchung der Energieverhältnisse gelegt, da ja die Energie jener Bewegung ist, der mit den anderen Kapiteln der Physik, vor allem mit der Quantenmechanik, eine Verbindung herstellt. Es ist zu hoffen, dass eine allgemeine Behandlung der Dynamik des Massenpunktes befruchtend auf das Studium der relativistischen Effekte und Möglichkeiten wirken wird, in erster Linie in der Kernphysik und in der Theorie der Elementarteilchen. Dies erscheint vor allem schon deshalb möglich, da sie letztlich den Überblick über die Ergebnisse der betreffenden quantentheoretischen Methoden erleichtert.

Die auf die punkartigen Teilchen der Atomphysik einwirkenden Kräfte rühren von dem die Teilchen umgebenden Feld her. Die Feldtheorie liefert ein eindeutiges Verfahren zu ihrer Bestimmung [1]. Die Lagrangefunktion bestimmt die Form des Energie-Impuls-Tensors T_{ik} des Feldes. Die Divergenz von T_{ik} liefert die Kraftdichte, und deren Integral wieder die Kraft.

$$F_i = - \int \partial_k T_{ik} \frac{dt}{d\tau} dV.$$

Dies steht auf der rechten Seite der kovarianten Bewegungsgleichung. Die linke Seite ist im Sinne des II. Axioms von Newton der Differentialquotient des Impulses p_i . Da sich unter den Kennwerten für die Bewegung des einfachen Massenpunktes nur ein einziger Vektor befindet, die Vierergeschwindigkeit u_i ($u_i u_i = -c^2$), kann der Impuls p_i in der Form $p_i = M u_i$ angenommen werden. Die Bewegungsgleichung des Teilchens lautet:

$$\frac{d}{d\tau} (M u_i) = F_i.$$

Aus dieser Gleichung erhält man nach Multiplikation mit u_i :

$$\frac{dM}{d\tau} = - \frac{1}{c^2} F_i u_i.$$

Der Vergleich mit der Newtonschen Dynamik wird durch die dreidimensionale Schreibweise erleichtert. Es sei nun dem Gedankengang von MÖLLER [2] gefolgt bzw. dieser verallgemeinert. Der Impuls p_i enthält den Dreierimpuls und die Teilchenenergie, F_i die Newtonsche Kraft und die Leistung.

$$p = p_{1,2,3} = \frac{Mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad E = \frac{c}{i} p_4 = \frac{Mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad (4)$$

$$\mathfrak{R} = F_{1,2,3} \sqrt{1 - v^2/c^2}, \quad W = \frac{c}{i} F_4 \sqrt{1 - v^2/c^2}.$$

Die Bewegungsgleichung (2) gibt das Gesetz der Veränderung von Energie und Impuls.

$$\frac{dp}{dt} = \mathfrak{R}, \quad \frac{dE}{dt} = W. \quad (5)$$

Wird die Leistung W ausschliesslich zur Ausführung von Geschwindigkeits-erhöhung hervorufender »kinetischer Arbeit« aufgewandt, so ist $W dt = \mathfrak{R} dt$, also

$$d(Mc^2) = -F_i dx_i = \frac{W dt - \mathfrak{R} dt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = 0, \quad \text{dann } M = \text{const.} \quad (6)$$

Im allgemeinen besteht aber zwischen den auf Grund der Gleichung (1) auf feldtheoretischem Wege bestimmten F_i -Komponenten, zwischen \mathfrak{R} und W , nicht die Beziehung (6). Neben einer Veränderung der Geschwindigkeit bewirkt F_i auch eine Erhöhung der inneren Energie. Diese letztere Form der Energie-übergabe sei mit $d'Q_0$ bezeichnet und innere Arbeit genannt. Auf Grund der Formel (3) ist:

$$d'Q_0 = -F_i dx_i = d(Mc^2). \quad (7)$$

Unter Verwendung dieser Gleichung gelangt man von dem Ausdruck (5) zu folgender Energiegleichung:

$$dE = d'A + d'Q. \quad (8)$$

Die Wirkung des Feldes vermag durch F_i die Energie des Teilchens auf zweierlei Weise zu erhöhen. Durch Beschleunigung des Teilchens kann sie seine kinetische Energie erhöhen (dies wird durch die kinetische Arbeit $d'A = \mathfrak{R} dt$ ausgedrückt), doch kann sie unabhängig vom Bewegungszustand auch die innere Energie verändern (dies wird durch die innere Arbeit $d'Q = -F_i dx_i \sqrt{1 - v^2/c^2}$ beschrieben). Abgesehen von Spezialfällen treten beide Wirkungen gleichzeitig auf.

Die zweierlei Wirkung der Minkowskischen Kraft F_i lässt sich auch kovariant trennen. Die Beschleunigung wird durch die senkrecht zur Weltlinie

wirkende Komponente, die Veränderung der inneren Energie durch die tangentielle Komponente hervorgerufen.

$$du_i = \frac{1}{M} F_i^{(n)} d\tau, \quad d(Mc^2) = -F_i^{(t)} dx_i,$$

$$F_i^{(t)} = -\frac{1}{c^2} u_i u_r F_r, \quad F_i^{(n)} = F_i - F_i^{(t)}.$$

Die Bewegung kann auch durch die Leistung der inneren Arbeit, durch M in entscheidender Weise beeinflusst werden [3]. Die Beschleunigung weist in der Gleichung (9) im allgemeinen in die Richtung $F_i^{(n)}$. Wenn jedoch F_i einer hinreichend langen Strecke der Weltlinie eine tangentielle Komponente hat, wird M in einem gewissen Punkt P_0 zu Null. Wird die Massenkonzentration, die in kraftfreien, unendlich entfernten Stellen die Ruhmasse bestimmt, m bezeichnet, so ergibt sich aus der Integration der Gleichung (3):

$$M(\tau) = m - \frac{1}{c^2} \int_{\infty}^{P(\tau)} F_i dx_i = m + \frac{1}{c^2} \int_{\infty}^{P(\tau)} d' Q_0.$$

Hieraus geht hervor, dass die Bedingung für das Eintreten von $M = 0$ dass die innere Arbeit den Wert $Q_0 = -mc^2$ erreicht. Beim Durchschreiten von P_0 kann $M < 0$ werden. In diesem Falle nehmen die beschleunigende Kraftkomponente $F_i^{(n)}$ und die Beschleunigung $du_i/d\tau$ eine gegensätzliche Richtung

2. Bewegung ohne innere Arbeit (die Lorentzsche Kraft)

Der Energie-Impuls-Tensor des elektromagnetischen Feldes liefert für Punktladung die Lorentzsche Kraft:

$$F_i = \frac{e}{c} f_{ik} u_k = \frac{e}{c} (\partial_i \varphi_k - \partial_k \varphi_i) u_k.$$

Der Kraftausdruck enthält die Geschwindigkeit u_i , so dass zwischen ihr und der Richtung der Weltlinie eine stramme Korrelation besteht, indem F_i immer eine normale Lage einnimmt. Die zwangsläufige Folge davon ist laut der Gleichung (3), dass M konstant ist ($M = m$) sowie dass die als Quotient des Dreierimpulses und der Dreiergeschwindigkeit aufgefasste träge Masse \mathcal{M} die Erscheinung der »relativistischen Massenvergrößerung« zeigt:

$$\mathcal{M} = \frac{p}{v} = \frac{m}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

Die Tatsache, dass die tangentielle Kraftkomponente, also die innere Arbeit, gleich Null ist, stellt jedoch einen Ausnahmefall dar, der sich sozusagen ausschliesslich auf die Lorentzsche Kraft beschränkt. Die Gesetze der Feldtheorie bestimmen stets eindeutig alle vier Komponenten von F_i , und diese vier Komponenten ergeben sich im allgemeinen als unabhängig voneinander. Die logische Folge davon ist, dass jede Komponente der Bewegungsgleichung (2) einen von den anderen unabhängigen physikalischen Inhalt besitzt. Sie beschreiben ausser der Geschwindigkeit v auch die Veränderung der inneren Energie Mc^2 . Der Umstand, dass die vierte Komponente von F_i durch Überlegungen der Feldphysik und der Kovarianz bestimmt wird, so dass die Postulierung der Konstanz der Ruhmasse zu einem Widerspruch führen kann, wird häufig ausser acht gelassen. Im folgenden seien die vier Komponenten von F_i als voneinander unabhängig gegebene Grössen betrachtet. Damit sollen alle reicheren Möglichkeiten ausgenutzt werden, die durch die Heranziehung von mehr Komponenten als in der Newtonschen Theorie, d. h. durch die Berücksichtigung der inneren Arbeit auf dynamischem Wege geboten werden.

Das älteste bekannte Beispiel für das Auftreten der inneren Kraft fällt gerade in das Gebiet der makroskopischen Elektrodynamik. Die auf die Volumeneinheit eines von einem konduktiven Strom durchflossenen Leiters wirkende Kraft beträgt $F_i = \frac{1}{c} f_{ik} j_k$. Es ist leicht einzusehen, dass in diesem Falle die Beziehung (12) nicht mehr gilt, da ja die Geschwindigkeit u_i des Leiters und die Dichte j_i des konduktiven Stromes im allgemeinen nicht parallel sind. Wie schon von ABRAHAM gezeigt wurde, ist $d'Q_0$, d. i. (nach der hier eingeführten Terminologie) die innere Arbeit, identisch mit der sich auf Kosten der Feldenergie entwickelnden Jouleschen Wärme. Die Komponente F_i drückt in der Sprache der Dynamik auch noch aus, dass das Feld auf den leitenden Körper neben der Beschleunigung auch noch durch die Wärmeentwicklung eine Wirkung ausübt. Die durch letztere bewirkte Trägheitszunahme beeinflusst die Bewegung ebenfalls.

3. Bewegung bei innerer Arbeit (skalares Potentialfeld)

Das einfachste Beispiel für eine innere Arbeit bewirkende Kraft ist jene Kraft, die durch das skalare Potentialfeld (skalare Mesonenfeld) ausgeübt wird. Dieses wurde in letzterer Zeit von mehreren Forschern diskutiert [4, 5, 6, 7, 8, 9]. Im nachstehenden seien die uns interessierenden Probleme kurz zusammengefasst. Die Kraft lässt sich aus dem Skalar $\varphi(x)$ wie folgt herleiten:

$$F_i = -g \partial_i \varphi(x), \quad g = \text{const.} \quad (13)$$

Als erster wies NOVOBÁTZKY darauf hin [4], dass die innere Arbeit im Fall

der Gleichung (13) ein vollständiges Differential ist, aus dem sich die Masse durch Integration ergibt*. In einem Skalarfeld verändert sich die Teilchenmasse nicht nur infolge der Erhöhung seiner Geschwindigkeit, sondern auch aus einem anderen Grund, infolge der Änderung der inneren Energie:

$$d(Mc^2) = d'Q_0 = -F_i dx_i = g d\varphi,$$

also

$$M = m + \frac{g \varphi(x)}{c^2}.$$

Die Ruhmasse nimmt zu, wenn sie an einen Ort mit höherem Potential gelangt, während sie im Falle eines Potentialabfalles abnimmt. Die Bewegung wird also nicht durch die Feldstärke ($-\text{grad } \varphi$), sondern über M durch φ selbst beeinflusst. Anschaulich kann man sagen, dass die Orte mit höherem Potential als »heisser« anzusehen sind: das Eintreffen der Ruhmasse an einem solchen Ort ist mit einer inneren Energiezunahme, mit einer »Wärmeaufnahme« verbunden. Ebenso entspricht das niedrigere Potential einem »kälteren« Ort, wohin ein Teilchen nur um den Preis einer »Abkühlung«, einer Abnahme der inneren Energie, eines Massenverlustes gelangen kann**. (Das elektromagnetische Feld ist von diesem Gesichtspunkt aus »isotherm«, dort tritt die Veränderung der inneren Energie nicht von selbst ein.) Die Frage, was für eine Zustandsänderung der Struktur des Teilchens mit der Anhäufung der inneren Energie einhergeht, lässt sich auf dieser Stufe nicht beantworten. Der Ausdruck $d'Q_0$ sagt nämlich ebenso nichts über die Beschaffenheit der inneren Arbeit aus, wie die phänomenologische Thermodynamik über die Beschaffenheit der Wärme. Die Beschaffenheit der Wärme wurde erst nach der Erkenntnis der atomaren Struktur der Materie verstanden. Ebenso ist auch die anschauliche Deutung der Ruhmasse und der inneren Arbeit erst von der Erkenntnis der Struktur der Elementarteilchen, von der Zukunft zu erwarten. Es sei jedoch gestattet, sich hier auf eine Möglichkeit hinzuweisen. Es ist vorstellbar, dass beim Durchschreiten des Potentialgradienten in den Kohäsionskräften, die die Ladungsteilung des Teilchens im Gleichgewicht halten und die Wirkung des Eigenfeldes ausgleichen, eine solche Umordnung eintritt, dass der neue Gleichgewichtsstand einem veränderten Energieinhalt entsprechen wird. (Die Massenpunkt-Abstraktion bezweckt ja eben, dass man bei der Untersuchung der Bewegung

* In einer formal völlig ähnlichen Gestalt tritt die innere Arbeit auch im Falle idealer Flüssigkeiten auf, die einem isotropen Druck ausgesetzt sind [10].

** Infolgedessen vermögen die elektromagnetischen Kräfte ein Teilchen, das sich auf einem Gebiet mit konstantem negativem Potential befindet (z. B. ein im Inneren des Atomkerns befindliches Nukleon), leichter zu beschleunigen, als wenn es sich an einem potentialfreien Ort aufhält.

auf eine eingehende Kenntnis der Kohäsionskräfte verzichten könne, indem man alle ihre Wirkungen mit dem Zahlenwert der inneren Energie Mc^2 erfasst.) Unser Ziel bei der Erwähnung dieser Möglichkeit bestand nur darin, die unserer Meinung nach tiefe physikalische Realität der Veränderung der Ruhmasse, der inneren Arbeit hervorzuheben.

Die die Bewegung beeinflussende Wirkung der inneren Arbeit geht auch daraus hervor, dass die kovariante Bewegungsgleichung im Grenzfall $v = 0$ im Gegensatz zum Falle der Lorentz'schen Kraft nicht in die nichtrelativistische Form übergeht. Es ist ferner gleichfalls offenbar, dass beim Erreichen des durch $g\varphi = -mc^2$ gekennzeichneten Punktes nach Gleichung (14) M zu Null und dann negativ wird. Auch im Falle von Anziehungskraft tritt die relativistische Abstossung auf [5, 6, 7].

Besonders gut lassen sich die Verhältnisse in einem statischen, also leitungs-freien Feld überblicken [7, 11]. In diesem Falle sind die Teilchenenergie und die träge Masse in der Zeit konstant:

$$E = \mathcal{M}c^2 = \frac{mc^2 + g\varphi(x)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \text{const.} \quad (16)$$

Es tritt nicht die durch den Ausdruck (12) gegebene »relativistische Massenvergrößerung« auf, im Gegensatz zum Fall des elektrostatischen Feldes. (Die Ursache für den Unterschied besteht darin, dass im mesostatischen Feld die zu \mathcal{M} proportionale Teilchenenergie E an sich konstant ist, während dies im elektrostatischen Feld nur bei der Summe der Teilchenenergie E und der Feldenergie der Fall ist.) Bei Heranziehung der Gleichung (16) lässt sich in der Bewegungsgleichung $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ durch die Konstante E eliminieren.

$$m \frac{dv}{dt} = -\text{grad } U, \quad U = \left(\frac{mc^2}{E} \right)^2 \left(g\varphi + \frac{g^2 \varphi^2}{2mc^2} \right). \quad (17)$$

Dies ist eine Bewegungsgleichung von völlig Newtonscher Form, mit dem Verleschen »äquivalenten Potential« U an Stelle von $g\varphi$. Sowohl hieraus als auch aus der Gleichung (30) ist klar ersichtlich, dass

- im Falle $g\varphi > -mc^2$ dv/dt und $-\text{grad } \varphi$ parallel sind (»Anziehungs-Zone),
- im Falle $g\varphi = -mc^2$ $v = c$ und $dv/dt = 0$,
- im Falle $g\varphi < -mc^2$ dv/dt und $-\text{grad } \varphi$ antiparallel sind (»Abstossungs-Zone).

Auch hieraus geht hervor, dass das Auftreten der inneren Arbeit den Verlauf der Bewegung im Vergleich zum Fall des elektrostatischen Feldes

von Grund auf verändert, es fällt die »relativistische Massenvergrößerung« weg, anstatt dessen beschleunigt sich das Teilchen in einer endlichen Zeit infolge eines endlichen Potentialabfalls bis zur Lichtgeschwindigkeit. Dann tritt infolge der negativ werdenden inneren Energie die Erscheinung »relativistischer Abstoßung« auf.

4. Die von der inneren Energie abhängigen Kräfte

Das erste Beispiel für die relativistische Bewegung in einem Skalarfeld wurde in 1912 von NORDSTRÖM in seiner Gravitationstheorie gegeben [1]. Laut seiner Theorie, die sich seither als unzulänglich erwiesen hat, ist die Gravitationskraft der inneren Energie Mc^2 proportional (und nicht der Gesamtenergie $\mathcal{M}c^2$, wie in Wirklichkeit):

$$F_i = -M\partial_i\varphi. \quad (1)$$

Durch Einsetzen in die Formel (3) und Integrieren gelangte NORDSTRÖM zu folgender Beziehung zwischen innerer Energie und Potential:

$$M = me^{\varphi/c^2}. \quad (2)$$

Es ist ersichtlich, dass in diesem Falle die Ruhmasse bei keinem endlichen Wert von φ den Wert Null oder einen negativen Wert annimmt, es wird also im Falle der Kraft (18), trotzdem eine innere Arbeit geleistet wird, die Lichtgeschwindigkeit nicht erreicht und die Erscheinung der »relativistischen Abstoßung« tritt nicht auf. Das statische Feld ist auch jetzt leistungsfrei und die Bewegungsgleichung lässt sich auf die Newtonsche Form (17) bringen. Das relativistischen Wirkungen enthaltende »äquivalente« Potential ist in der Form

$$U = \frac{mc^2}{2} \left(\frac{mc^2}{E} \right)^2 e^{2\varphi/c^2}$$

anzusetzen.

Vom formalen Gesichtspunkt sowie auch von dem seiner Anwendung ist jener Fall interessanter, wo die Kraft dem Reziprokwert der Ruhemasse proportional ist:

$$F_i = \frac{1}{M} f_i. \quad (3)$$

Hier ist f_i ein von der Masse unabhängiger Ausdruck, der als »Feldstärke« angesehen werden kann und sich eventuell als Gradient eines nur von einem Ort abhängigen Skalars $\varphi(x)$ herleiten lässt ($f_i = -\text{grad } \varphi$). Ob nun eine solche

Kraft in der Natur vorkommt oder nicht, sei jetzt vorläufig nicht untersucht, sondern nur die formalen Folgeerscheinungen betrachtet. Wenn f_i ein Vektor ist, dann wird auch F_i ein Vektor sein, also wird die Gleichung (20) die Forderung der Lorentzschen Kovarianz befriedigen. Setzt man die Formel (20) in die Gleichung (3) ein, so ergibt sich für die Ruhmasse M folgender Ausdruck:

$$M \frac{dM}{d\tau} = -\frac{1}{c^2} f_i u_i, \quad (21)$$

$$M(P) = \sqrt{m^2 - \frac{2}{c^2} \int_{\infty}^P f_i dx_i} \quad \left(= \sqrt{m^2 + \frac{2}{c^2} \varphi} \right).$$

Wenn die Feldstärke leistungsfrei ist ($f_4 = 0$), ist die Teilchenenergie konstant.

$$E = \frac{Mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = mc^2 \left[\frac{1 - \frac{2}{m^2 c^2} \int_{\infty}^P f_i dx_i}{1 - v^2/c^2} \right]^{1/2} = \text{const.} \quad (22)$$

Aus den ersten drei Komponenten der Bewegungsgleichung kann $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ wieder durch die konstante Energie ausgedrückt werden:

$$\frac{dv}{dt} = \left(\frac{c^2}{E} \right) \mathfrak{F}. \quad (23)$$

Wenn ein leistungsfreies Feld ist, also die Beschleunigung streng proportional der Feldstärke, die Bewegung hat in volstem Ausmass einen Newtonschen Charakter, die »relativistische Massenvergrößerung« tritt nicht auf.

Dies hat eine überraschende Folge: es besteht nämlich nicht das geringste Hindernis, dass das auf einem ziemlich grossen Gebiet in eine einzige Richtung wirkende Feld das Teilchen über die Lichtgeschwindigkeit hinaus beschleunigt. Aus dem Ausdruck (23) ist ersichtlich, dass in der Bewegungsgleichung keinerlei Anomalie beim Erreichen und Überschreiten der Lichtgeschwindigkeit auftritt. Das durch die Gleichung (20) ausgedrückte kovariante Kraftgesetz kann also eine über der Lichtgeschwindigkeit liegende Bewegung selbst bei vernünftigen Randbedingungen zur Folge haben! Aus der Energiegleichung (22) geht die Bedingung für das Überschreiten der Lichtgeschwindigkeit wie folgt hervor:

$$\begin{aligned}
 \text{Wenn} \quad & \int_{\infty}^P f_i dx_i (= -\varphi) < \frac{1}{2} m^2 c^2, & \text{ist} \quad v < c, \\
 & \int_{\infty}^P f_i dx_i (= -\varphi) = \frac{1}{2} m^2 c^2, & v = c, \\
 & \int_{\infty}^P f_i dx_i (= -\varphi) > \frac{1}{2} m^2 c^2, & v > c.
 \end{aligned} \tag{24}$$

Beim Überschreiten der Lichtgeschwindigkeit werden die Vierergeschwindigkeitskomponenten, die innere Energie und die Minkowskische Kraft imaginär. Diese besitzen also keine unmittelbar messbare physikalische Bedeutung. Die Geschwindigkeitskomponenten, die Beschleunigung, der Impuls und die Newtonsche Kraft bleiben reell und endlich. Die Gesamtenergie und die träge Masse (im leistungsfreien Feld) konstant. Obwohl das solche Folgen zulassende kovariante Kraftgesetz (20) in keinem formalen Widerspruch zum Prinzip der Relativität steht, ist es offenbar mit dem Wesen des Relativitätsprinzips dennoch unvereinbar. Bei Wirkungen, die zusammen mit sich schneller als c fortbewegenden Teilchen eintreffen, könnte sich das nämlich der Fall verwirklichen, dass von gewissen Inertialsystemen aus gesehen die Wirkung der Ursache vorangeht.

Es ist überflüssig darzulegen, wie unerwartet das Auftreten solcher Kräfte in der relativistischen Dynamik ist. Die Erklärung, warum man im allgemeinen nicht an diese Möglichkeit denkt, ist folgende: Die ersten drei Komponenten der Bewegungsgleichung lassen sich wie folgt schreiben:

$$\frac{dp}{dt} \equiv \frac{d(Mv)}{dt} = \vec{F} \sqrt{1 - v^2/c^2} = \mathfrak{R}.$$

Im Falle $v \rightarrow c$ konvergiert die auf die Zeiteinheit fallende Impulsänderung, d. h. die effektive Newtonsche Kraft \mathfrak{R} im allgemeinen gegen Null. Eine Abnahme kann nur dann eintreten, wenn die auf feldtheoretischem Wege hergeleitete Minkowskische Kraft F_i eben beim Erreichen des Bewegungszustandes $v = c$ eine Singularität aufweist. [Im Falle der Gleichung (20) trifft dies jedoch ist es leicht, auch weitere kovariante, z. B. geschwindigkeitsabhängige Kraftausdrücke mit ähnlichen Eigenschaften zu konstruieren.] Es ist also festzustellen, dass die formale Forderung der Lorentzschen Kovarianz den physikalischen Inhalt des Relativitätsprinzips unvollkommen ausdrückt. Etwas anderes lässt das Auftreten solcher Kräfte zu, während letzteres dieses verbietet.

* Zu einer grundsätzlich ähnlichen Folgerung gelangte BLOCHINZEW in der Feldtheorie [1]. Er wies nach, dass es Lorentz-kovariante nichtlineare Feldgleichungen gibt, die zu grösseren Wirkungsgeschwindigkeiten als c führen können.

Es stellt sich nun die Frage, ob die Möglichkeit des Auftretens von Kräften vom Typ der Gleichung (20) in konkreten Untersuchungen aufgetaucht ist. In der klassischen Physik wurden solche Kräfte nicht benutzt, so dass das auf die obigen Kräfte bezügliche Verbotprinzip keine der bisherigen Forschungsergebnisse berührt. Bei der Untersuchung der klassischen Modelle der quantenmechanischen Zustandsgleichungen wurde jedoch die Möglichkeit eines Kraftgesetzes von der Form (20) bzw. einer Massenformel von der Form (21) bereits mehrere Male aufgeworfen.

In den letzten Jahren wiesen mehrere Forscher darauf hin, dass der reelle und imaginäre Teil der nichtrelativistischen und relativistischen Schrödingergleichung die Hamilton-Jacobische und Kontinuitätsgleichung der Bewegung einer Punktgesamtheit liefert, die sich völlig nach den Gesetzen der klassischen Dynamik bewegt. Neu ist einzig und allein, dass neben den äusseren Kräften auch eine innere Kraft auftritt, die sich aus einem von der Dichte der Punktgesamtheit abhängigen Potential ableiten lässt. Als klassisches Modell des durch die relativistische Schrödinger-Gordonsche Gleichung beschriebenen Zustands dient eine klassische Punktgesamtheit, deren Hamilton-Jacobische Gleichung folgendermassen lautet [4, 14]:

$$\frac{1}{2M} \left(\partial_i S - \frac{e}{c} \varphi_i \right) \left(\partial_i S - \frac{e}{c} \varphi_i \right) + \frac{1}{2} M c^2 = 0, \quad (25)$$

$$M = m \sqrt{1 - \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \frac{\square |\psi|}{|\psi|}}.$$

Daraus ergibt sich als charakteristische Gleichung die folgende Bewegungsgleichung:

$$\frac{d}{d\tau} (M u_i) = \frac{e}{c} f_{ik} u_k - \frac{1}{M} \partial_i \varphi, \quad \varphi = - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\square |\psi|}{|\psi|}. \quad (26)$$

Neben der Lorentzschen Kraft erschien eine Kraft, die kovariante Verallgemeinerung der »quantenmechanischen Kraft«, die gerade vom Typ der Gleichung (20) war. Es ist aber offenbar, dass sich die obigen Schwierigkeiten nicht auf diesen Fall beziehen. Jene Teilchen, die dem Bewegungsgesetz (25) gehorchen, sind nur die Glieder einer Modellgesamtheit. Sie sind nicht reell, obwohl sie die Wirklichkeit widerspiegeln, ebenso wie z. B. die »Teilchen« der Gibbsschen Gesamtheit. Dieser Tatbestand hat zur Folge, dass die Teilchen keine Wirkungsfortpflanzung (schneller als c) verwirklichen können. Abgesehen davon ist jedoch das Kraftgesetz (20) widerspruchsfrei.

Ein zweites Beispiel wird von der relativistischen Diracschen Gleichung des Elektrons geliefert. BROGLIE leitete eine der Gleichung (25) ähnliche Bezie-

hung aus der Diracschen Gleichung ab [15]. In dieser Gleichung erscheint mit dem magnetischen Feld zusammenhängendes Glied, das die auf das eig. magnetische Moment des Elektrons wirkende Translationskraft beschreibt. Es ist leicht nachzuweisen, dass die entsprechende charakteristische Gleichung einen Kraftausdruck

$$F_i = -\frac{e}{Mc} S_{rs} \partial_i f_{rs}$$

enthält, sowie dass die Massenformel die auch bei BROGLIE vorkommt, charakteristische Wurzelform (21) aufweist:

$$M = \sqrt{m^2 + \frac{e}{c^3} S_{rs} f_{rs}}.$$

Im Nenner des Kraftausdruckes erschien die Masse infolge des bekannten Ausdrucks des Bohrschen Magnetons und ermöglicht auch jetzt — wenn man sich an Hand einer einfachen Rechnung überzeugen kann — das Überschreiten der Lichtgeschwindigkeit. Ein analoges Ergebnis lässt sich auch in den Fall des in einem pseudoskalaren Mesonenfeld bewegten Teilchens leiten.

Dass diese Kräfte im klassischen Grenzfall verschwinden, geht daraus hervor, dass in ihnen M immer in der Kombination hM^{-1} bzw. h^2M^{-1} kommt. Hier ist h die Plancksche Konstante.

5. Variationsprinzipien

Es sei ein Massenpunkt betrachtet, der sich bei einer vorgeschriebenen Zwangsbedingung infolge der Wirkung der freien Kraft F_i bewegt. Der Einfluss der Zwangsbedingung wird durch die Zwangskraft F'_i in Rechnung gestellt.

$$\frac{d}{d\tau} (Mu_i) = F_i + F'_i.$$

Die Rolle der Zwangskraft besteht darin, dass sie durch einen minimalen Eingriff in den Verlauf der Bewegung die jederzeitige Erfüllung der allgemeinen Zwangsbedingung

$$a_i(x) \delta x_i = 0$$

gewährleistet. Die Form von F'_i ist nicht bekannt, doch ermöglicht die Anwendung des Prinzips des »minimalen Eingriffs« die eindeutige Bestimmung der Zwangskraft.

Die Bewegungsgleichung (46) lautet in dreidimensionaler Bezeichnung wie folgt :

$$\frac{d\mathfrak{p}}{dt} = \mathfrak{R} + \mathfrak{R}', \quad \frac{dE}{dt} = W + W' . \quad (30)$$

Der »minimale Eingriff« der Zwangskraft kann folgenderweise formuliert werden: \mathfrak{R}' verändere die Energie des Massenpunktes bei jeder durch (29) zugelassenen Bewegung nur in der Form der notwendigsten Geschwindigkeitsänderung, d. h. ausschliesslich durch kinetische Arbeit

$$(\delta E)' = W' \delta t = \mathfrak{R}' \delta \mathbf{r}, \quad \text{folglich} \quad F'_i \delta x_i = 0 . \quad (31)$$

Die innere Arbeit der Lorentzischen Kraft beträgt im Laufe der wirklichen Verrückung $dx_i = u_i d\tau$ Null. Von der Zwangskraft wird mehr verlangt, nämlich dass die innere Arbeit bei jeder zulässigen Verrückung δx_i verschwinde.) Setzt man den Ausdruck der Zwangskraft aus der Gleichung (28) bzw. (30) in die Formel (31) ein, so erhält man die kovariante Form des D'Alembertschen Prinzips wie folgt :

$$\left(\frac{d\mathfrak{p}}{dt} - \mathfrak{R} \right) \delta \mathbf{r} = \left(\frac{dE}{dt} - W \right) \delta t, \quad \text{d. h.} \quad \left[\frac{d}{d\tau} (M u_i) - F_i \right] \delta x_i = 0 . \quad (32)$$

Wenn nun gerade die freie Kraft die ganze Zeit hindurch normal ist (keine Arbeit leistet)

$$F_i u_i = 0, \quad \text{dann ist} \quad \frac{dE}{dt} = \frac{d\mathfrak{p}}{dt} v, \quad W = \mathfrak{R} v,$$

und dann kann das D'Alembertsche Prinzip auch in folgender Form geschrieben werden :

$$\left(\frac{d\mathfrak{p}}{dt} - \mathfrak{R} \right) \delta^* \mathbf{r} = 0, \quad \text{wo} \quad \delta^* \mathbf{r} = \delta \mathbf{r} - v \delta t. \quad (33)$$

Dies ist die allgemein bekannte Form des D'Alembertschen Prinzips, wo $\delta^* \mathbf{r}$ die »zeitlos« vorsichgehende »virtuelle« Verrückung bedeutet. Der keineswegs so sehr physikalisch zu bezeichnende Begriff der virtuellen Verrückung musste deswegen in die Newtonsche Mechanik eingeführt werden, damit man das D'Alembertsche Prinzip in die Form des nicht zu der Natur des Problems passenden dreidimensionalen Vektorproduktes einzwängen konnte. Obwohl die Geschwindigkeit der Zwangsbewegungen stets nichtrelativistisch ist, wird der wirkliche Inhalt des D'Alembertschen Prinzips dennoch besser durch die Formulierung (32) zum Ausdruck gebracht als durch die übliche Form (33). Dies weist die tiefere und somit wertvollere Natur der relativistischen (mit vier Kraftkomponenten arbeitenden) Anschauung.

Mit der Frage der kovarianten Form des D'Alembertschen Prinzips sich (ausgehend von der Fassung von GY. FARKAS) auch FÉNYES befaßt [16].

Von dem kovarianten D'Alembertschen Prinzip kann man leicht konkreten Form der Zwangskraft gelangen, wenn man die Nebenbedingung (47) mit der Methode des Lagrangemultiplikators in Betracht zieht:

$$\frac{d}{d\tau}(Mu_i) = F_i + \lambda(\tau) a_i(x).$$

Unbekannt sind jetzt die Größen u_i , M und λ , die durch die Gleichungen (28) und (29) bestimmt werden können. Die kovariante Form der Lagrangegleichungen erster Art (34) wurde unabhängig vom D'Alembertschen Prinzip auf Grund der Zwangskraft von MÁTRAI angegeben [17].

Aus dem D'Alembertschen Prinzip lässt sich leicht das (übrigens schon längst angeschriebene) kovariante Hamiltonsche Prinzip herleiten. Da die Beziehungen zwischen der Eigenzeit und den Koordinaten bei der Variation eine unangenehme Nebenbedingung bedeuten würden, wird die Weltlinie der Bewegung in der mit Hilfe eines beliebigen Parameters p beschriebenen Form $x_i(p)$ gesucht. Als Folge der Gleichung (32) ergibt sich:

$$w F_i \delta x_i = \frac{d}{dp} \left(\frac{M}{w} x'_i \delta x_i \right) + \delta (Mc^2 w) w c^2 \delta M,$$

wo

$$w = -\frac{1}{c^2} x'_i x'_i, \quad \left(x'_i = \frac{dx_i}{dp} \right).$$

Es seien beide Seiten der Gleichung zwischen solchen Grenzen integriert, $\delta x_i = 0$:

$$\delta \int Mc^2 w dp - \int (F_i \delta x_i + c^2 \delta M) w dp = 0.$$

Mit Rücksicht auf die Deutung der Eigenzeit lässt sich die Formel (36) auch folgendermassen schreiben:

$$\delta \int Mc^2 d\tau(p) - \int (F_i \delta x_i + c^2 \delta M) d\tau(p) = 0.$$

Es ist ersichtlich, dass sich die Formel dann am einfachsten gestaltet, wenn der Parameter $p \equiv \tau$ gewählt wird. Allerdings können sämtliche Ergebnisse auch in einer von der Parameterwahl unabhängigen Gestalt geschrieben werden:

$$\delta \int Mc \sqrt{-dx_r dx_r} = \int \left(\frac{1}{c} F_i \delta x_i + c \delta M \right) \sqrt{-dx_r dx_r}.$$

Als wichtigste Anwendung sei das Variationsprinzip für den Fall der lorentzischen Kraft angeschrieben. Da in diesem Fall $M = m = \text{const.}$, $\delta M = 0$ und $F_i \delta x_i$ einfach umformbar sind, erhält man die Weylsche Form:

$$\delta \int \left(mc^2 d\tau - \frac{e}{c} \varphi_i dx_i \right) = 0. \quad (39)$$

In anderer wichtiger Fall ist derjenige der konservativen Kräfte. Es ist bekannt, dass für jeden beliebigen Fall die Beziehung (6) gilt. Es gibt indessen spezielle Kräfte, für die diese Beziehung nicht nur bei der wirklichen Verrückung $dx_i = u_i \delta \tau$, sondern bei jeder zulässigen Verrückung Gültigkeit hat:

$$F_i \delta x_i = -c^2 \delta M.$$

solche Kräfte seien hier konservative Kräfte genannt. Dies bedeutet bei freier Bewegung, dass diese Kräfte ein invariantes Potential haben und dass dieses gerade die innere Energie ist:

$$F_i = -\partial_i (Mc^2). \quad (40)$$

Das Hamiltonsche Prinzip (37) bzw. (38) nimmt bei konservativen Kräften eine besonders einfache Gestalt an:

$$\delta \int Mc^2 d\tau = 0 \quad \text{oder in anderer Form:} \quad \delta \int Mc \sqrt{-dx_r dx_r} = 0. \quad (41)$$

Die Lagrangefunktion der konservativen Kräfte lautet also bei beliebiger Parameterwahl

$$L(x, x') = M(x) c \sqrt{-x'_r x'_r}. \quad (42)$$

Nachdem, ob man M nach der Gleichung (14), (19) oder (21) wählt, erhält man aus dem Variationsprinzip der skalaren Potentialkraft, der Nordströmschen Gravitationskraft bzw. der dem Reziprokwert der Masse proportionalen Kraft. Der Urtheil des Variationsprinzips besteht darin, dass sie die parameterunabhängige Formulierung des Bewegungsproblems gestattet. Es könnte nämlich der Gedanke auftauchen, dass die in der Nähe des durch $M = 0$ gekennzeichneten Punktes auftretenden überraschenden Ergebnisse (die »relativistische Abstossung« und die Überschreitung der Lichtgeschwindigkeit) möglicherweise durch eine unrichtige Anwendung der Eigenzeit τ entstanden sind. (Hier wurde $d\tau$ zu Null, dann negativ bzw. imaginär.) Auf Grund des parameterunabhängigen Variationsprinzips lässt es sich leicht nachweisen, dass dieser mögliche Einwand nicht stichhältig ist, da sich jedes Ergebnis auch ohne Einführung von τ gewinnen lässt.

Auf eine Parameterwahl, die von einem anderen Gesichtspunkt besonders zweckmässig ist, hat kürzlich SZAMOSI hingewiesen [18]. Demzufolge ist der Parameter p so zu wählen, dass $w = M$ sei. In diesem Falle nimmt das Hamiltonsche Prinzip (36) die folgende Form an:

$$\int \left[\delta \left(\frac{1}{2} x'_r x'_r \right) + \frac{1}{2} M F_i \delta x_i + \frac{1}{4} \delta M^2 c^2 \right] dp = 0. \quad (42)$$

Falls es eine solche Funktion $U(x, x')$ gibt, für die

$$\frac{\partial U}{\partial x_i} \delta x_i + \frac{\partial U}{\partial x'_i} \delta x'_i = -\frac{1}{2} M F_i \delta x_i - \frac{1}{4} \delta (M^2 c^2) \quad (43)$$

gilt, dann lautet die Lagrangefunktion des Variationsproblems (43) wie folgt:

$$L = \frac{1}{2} x'_r x'_r - U(x, x'). \quad (44)$$

[Als Ausgangspunkt der Berechnungen SZAMOSI diente die Form (45); er konnte nachweisen, dass man bei jedem in Betracht kommenden Problem ein entsprechendes U finden kann und dass dieses bei vielen die Rolle des aus (17) vorkommenden äquivalenten Potentials spielt.] Der Vorteil der Parameterwahl nach SZAMOSI liegt darin, dass zwischen den x'_i jetzt keine ähnliche Beschränkung wie im Falle $u_i u_i = -c^2$ besteht, da ja $x'_i = p_i = M u_i$. Auf diese Weise wurde es möglich, die gesuchten vier Funktionen (die Geschwindigkeitskomponenten und die innere Energie $M c^2$) symmetrisch durch die vier unabhängigen Komponenten des Vierervektors p_i zu ersetzen und so die kanonische Behandlung in kovarianter Form zu begründen.

6. Dipolteilchen

In letzterer Zeit stellte es sich heraus, dass sich der einfache Massenzentrum nicht zur Beschreibung der über einen Spin S_{ik} verfügenden Teilchen eignet. Die Bewegungsgleichungen des Impulses und des Drehimpulses der Dipolteilchen sind die folgenden:

$$\frac{dp_i}{d\tau} = F_i, \quad (45)$$

$$\frac{d}{d\tau} (x_i p_k - x_k p_i + S_{ik}) = x_i F_k - x_k F_i + D_{ik}. \quad (46)$$

Hier ist D_{ik} das »innere Drehmoment«, das das Teilchen unmittelbar durch die

Spin angreift. Zur Elimination der überflüssigen Freiheitsgrade ist die Einschränkung

$$S_{ik} u_k = 0 \quad (48)$$

anzuführen. Die innere Energie wird auch jetzt durch die Gleichung

$$E_0 = c \sqrt{-p_i p_i} \quad (49)$$

beschrieben. Es ist indessen zweckmässig, die Ruhmasse M laut der Gleichung

$$M = -\frac{1}{c^2} p_i u_i \quad (50)$$

anzuführen. Multipliziert man nämlich die Gleichung (47) mit u_i und berücksichtigt man die Formeln (46) und (50), so gelangt man zu folgender Beziehung:

$$p_i = M u_i - \frac{1}{c^2} \left(\frac{dS_{ik}}{d\tau} - D_{ik} \right) u_k. \quad (51)$$

Setzt man nun diese Beziehung in die Formel (46) ein und multipliziert man es mit u_i , so erhält man das Gesetz der Veränderung der Ruhmasse:

$$\frac{dM}{d\tau} = -\frac{1}{c^2} F_i u_i + \frac{1}{c^4} u_i \frac{d}{d\tau} (D_{ik} u_k). \quad (52)$$

Für die Veränderung des Absolutwertes des Spins kann aus der Gleichung (7) folgende Beziehung abgeleitet werden:

$$\frac{dS^2}{d\tau} = S_{ik} D_{ik}, \quad \text{wo} \quad S^2 = \frac{1}{2} S_{ik} S_{ik}. \quad (53)$$

Es seien die erhaltenen Ergebnisse zuerst auf den Fall eines mit einem Spin verknüpften magnetischen Dipols mit dem konstanten Moment μ_{ik} angewandt. Bei diesem ist (durch einfache Verallgemeinerung der nichtrelativistischen Formeln):

$$\mu_{ik} = f S_{ik}, \quad F_i = \frac{1}{2} \mu_{rs} \partial_i f_{rs}, \quad D_{ik} = \mu_{ir} f_{kr} - \mu_{kr} f_{ir}. \quad (54)$$

Aus der Formel (53) geht hervor, dass $S^2 = \text{const.}$ Auf Grund der Formel (51) erhält man den Ausdruck des Impulses:

$$p_i = M u_i - \frac{1}{c^2} \left(\frac{dS_{ik}}{d\tau} u_k + \mu_{ir} f_{rs} u_s \right). \quad (55)$$

Aus der Integration der Ruhmasse (52) ergibt sich :

$$M = m - \frac{1}{2c^2} \mu_{rs} f_{rs} .$$

Durch Einsetzen der Ausdrücke (54), (55) und (56) in die Gleichungen (46) (47) gelangt man zu den zuerst von FRENKEL aufgestellten Bewegungsgleichungen des klassischen Elektrons [17]. Es ist ersichtlich, dass im Falle eines magnetischen Dipols — also auch bei einem rein elektrodynamischen Problem — die Veränderung der Ruhmasse, die Erscheinung der inneren Arbeit auftritt. Die Rolle der invarianten potentiellen Energie

$$V = - \frac{1}{2} \mu_{rs} f_{rs}$$

erinnert stark an die Rolle des Ausdrucks $g\varphi$ für das skalare Mesonenfeld.

Die Tatsache, dass die Veränderung der Ruhmasse einen wesentlichen Einfluss auf den Verlauf der relativistischen Bewegung ausübt, wird durch folgendes Beispiel beleuchtet. Es sei ein magnetostatisches Feld angenommen, das längs der x -Achse in die Richtung $+x$ wirkt. Der Dipol sei in einen Punkt der x -Achse verlegt, mit einem Dipolmoment in der x -Richtung. In diesem Fall hat der Impuls die Richtung x , ist die Energie konstant, desgleichen auch die Lage und die x -Komponente des Spins und des Dipolmoments :

$$p = p_1 = \frac{mc^2 - \mu H(x)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \frac{v}{c^2} , \quad E = \frac{mc^2 - \mu H(x)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \text{const.}$$

$$H(x) = f_{23} , \quad \mu = \text{const.}$$

Die Translationsbewegungsgleichung lautet dann folgenderweise :

$$\frac{dp}{dt} = \mu \frac{\partial H(x)}{\partial x} \sqrt{1 - v^2/c^2} .$$

Diese Gleichungen stellen vollständige Analoga der entsprechenden Gleichungen der Bewegung in einem statischen Skalarfeld dar, so dass sämtliche daraus gezogenen Folgerungen auch jetzt Gültigkeit besitzen. Die Bewegungsgleichung (59) lässt sich auch in folgender Form schreiben :

$$\begin{aligned} m \frac{dv}{dt} &= \left(\frac{mc^2}{E} \right)^2 \left(1 - \frac{\mu H(x)}{mc^2} \right) \mu \frac{\partial H(x)}{\partial x} = \\ &= - \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{mc^2}{E} \right)^2 \left(- \mu H(x) + \frac{\mu^2 H(x)^2}{2mc^2} \right) \right] . \end{aligned}$$

s ist also ersichtlich, dass ein bewegter Dipol auch bei anziehenden Momenten-
 zellungen nicht über alle Grenzen hinaus in die Nähe eines fixierten Dipols
 elangen kann, dass auch hier die Erscheinung der »relativistischen Abstossung«
 auftritt. Für den Abstossungsbereich, für das Negativwerden der Ruhmasse
 ist die Beziehung

$$\mu H(x) > mc^2 \quad (61)$$

charakteristisch.

Wesentlich ändert sich die Lage, wenn man den in der Formel (54) vor-
 kommenden Proportionalitätsfaktor f nicht als konstant, sondern als folgende
 Funktion der Ruhmasse annimmt:

$$f = -\frac{e}{Mc}. \quad (62)$$

Hierdurch kommt man zu der Form (27) der Ruhmasse, die von BROGLIE
 aus der Diracschen Gleichung hergeleitet wurde [15]. In diesem Falle tritt
 bei dem durch die Formel (62) charakterisierten Diracschen Elektron anstatt
 der »relativistischen Abstossung« Überschreiten der Lichtgeschwindigkeit ein.

Vom Gesichtspunkt der kernphysikalischen Anwendungen ist die Unter-
 suchung des im pseudoskalaren Mesonenfeld bewegten Dipols (Nukleons) von
 besonderem Interesse. Die diesbezüglichen Gleichungen wurden von HAVAS
 aufgestellt [20]. Das Dipolmoment ist jetzt aus Invarianzgründen ein Pseudo-
 vektor:

$$\mu_i = -\frac{if}{2c^2} \varepsilon_{ikrs} u_k S_{rs}, \quad (63)$$

wo ε_{ikrs} den völlig antisymmetrischen Levi-Civitaschen Pseudotensor bezeich-
 net. Die Kraft und das Drehmoment lauten jetzt in Analogie des Falles des
 magnetischen Dipols:

$$F_i = \mu_r \partial_r f_i, \quad D_{ik} = \mu_i f_k - \mu_k f_i, \quad (64)$$

wo jetzt $f_i = -\partial_i \varphi$ die aus dem pseudoskalaren Potential φ gebildete Feld-
 stärke ist. Auf Grund der Gleichungen (51) und (52) gelangt man zu der konkreten
 Form des Impulses:

$$\begin{aligned} p_i &= M u_i - \frac{1}{c^2} \left(\frac{dS_{ik}}{d\tau} u_k - \mu_i f_k u_k \right) = \\ &= \left(m - \frac{1}{c^2} \mu_k f_k \right) u_i - \frac{1}{c^2} \left(\frac{dS_{ik}}{d\tau} u_k - \mu_i f_k u_k \right). \end{aligned} \quad (65)$$

Diese Formel erinnert an den entsprechenden Ausdruck der Bewegung magnetischen Dipols. Untersucht man jedoch unter den für den Fall eines magnetischen Dipols eingehender diskutierten Bedingungen die Bewegung eines mesonischen Dipols, so gelangt man zu abweichenden Ergebnissen. In einem statischen Feld ergibt sich für die Bewegung längs der x -Achse

$$p = p_1 = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + \mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \text{const.} \quad (6)$$

$$\mu = \mu_1 \sqrt{1 - v^2/c^2} = \text{const.}$$

Die Translationsbewegungsgleichung lautet :

$$\frac{dp}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = - \mu \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}. \quad (7)$$

Die Form unserer Gleichung stimmt mit derjenigen der Bewegungsgleichung der elektrischen Punktladung überein. Die »relativistische Abstossung« tritt nicht auf, statt ihrer zeigt die träge Masse $p/v = \mathcal{M}$ die Erscheinung der »relativistischen Massenvergrößerung«.

Der Unterschied zwischen der Bewegung des magnetischen und des mesonischen Dipols beruht auf der Verschiedenheit des Transformationscharakters der Dipolmomente. Wenn der Dipol und die Geschwindigkeit parallel sind, ist das magnetische Moment eine Konstante der Bewegung, während sich das mesonische Moment gemäss $(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ ändert. (Auch der Unterschied zwischen der im skalaren Mesonenfeld und der im elektrostatischen Feld verlaufenden Bewegung wurde durch eine ähnliche Erscheinung hervorgerufen.)

7. Zusammenfassung

Die obigen Darlegungen und die als Illustration vorgeführten Beispiele beweisen, dass die Bewegungsgleichungen der relativistischen Dynamik weitreichere Möglichkeiten der verschiedenen Bewegungsformen zulassen, als man auf Grund der Untersuchung der Bewegung der Elektronen erwartet hat. Für den Fall eines starken Anziehungspotentials konnten je nach den verschiedenen Kovarianzeigenschaften drei hauptsächliche Bewegungsformen unterschieden werden :

a) *Relativistische Massenvergrößerung.* Innere Arbeit ist nicht vorhanden, die Teilchenenergie wird nur von der kinetischen Arbeit erhöht. Mit der Zunahme der Geschwindigkeit erhöht sich die Trägheit so sehr, dass sie bei jeder noch so grossen (endlichen) Kraft das Erreichen der Lichtgeschwindigkeit verhindert.

Fall der elektrischen Punktladung, des im pseudoskalaren Feld bewegten Dipols.)

b) *Relativistische Abstossung.* Die mit dem Potentialabfall einhergehende negative innere Arbeit vermindert die Ruhenergie. Die negative innere Arbeit und die positive kinetische Arbeit kompensieren einander, so dass die Trägheit trotz der Geschwindigkeitserhöhung begrenzt bleibt. Das Teilchen erreicht die Lichtgeschwindigkeit, gleichzeitig wird die Beschleunigung zu Null. Infolge der weiteren inneren Arbeit wird die innere Energie, die Ruhmasse negativ, die Beschleunigung und die Minkowskische Kraft werden eine entgegengesetzte Richtung haben, es treten die abstossende Wirkung des Anziehungspotentials und die Verminderung der Geschwindigkeit auf. (Fall der im Skalarfeld bewegten Punktladung, des klassischen magnetischen Elektrons.)

c) *Überschreitung der Lichtgeschwindigkeit.* Die Wirkungen der positiven kinetischen und der negativen inneren Arbeit kompensieren einander, infolgedessen bleibt die Trägheit begrenzt und das Teilchen erreicht nach einem endlichen Potentialabfall die Lichtgeschwindigkeit. Wegen des Singulärwerdens der Minkowskischen Kraft \mathfrak{F} wird in dieser Lage die der Grösse $\sqrt{1-v^2/c^2} \mathfrak{F}$ proportionale Beschleunigung nicht zu Null. Die Teilchengeschwindigkeit überschreitet die Lichtgeschwindigkeit. Infolge des entgegengesetzten Vorzeichens der kinetischen und der inneren Arbeit bleiben die träge Masse und die volle Teilchenenergie auch weiterhin endlich. (Im Zusammenhang mit den klassischen Modellen der Quantenmechanik, mit dem quantenmechanischen Potential und dem Diracschen Elektron auftretender Fall. Seine Verwirklichung wird im Fall von klassischen Teilchen durch das Relativitätsprinzip verboten.)

Natürlich sind dies nur die vereinfachten hauptsächlichen Bewegungsgesetzen, zwischen ihnen können zahlreiche Übergangstypen auftreten.

Auf Grund dieser Ausführungen muss hier festgestellt werden, dass die relativistische Dynamik nicht nur im Falle der der Lichtgeschwindigkeit nahekommenden grossen Geschwindigkeiten, sondern auch im Falle der die Ruhenergie annähernden grossen potentiellen Energien eine wesentliche Abweichung von der Newtonschen Dynamik aufweist. Inwieweit die von der letzteren Möglichkeit in der Natur gespielte Rolle wesentlich ist, werden ausser der elektrodynamischen in erster Linie die kernphysikalischen Forschungen zeigen. (Der beträchtliche negative Massendefekt der Atomkerne weist darauf hin, dass diese Rolle tatsächlich wichtig ist. Siehe diesbezüglich den Anhang.) So sei es gestattet, der Hoffnung Ausdruck zu geben, dass die Erweiterung des Rahmens der relativistischen Dynamik das Verständnis einiger mit den Atomkernen und Elementarteilchen zusammenhängenden Fragen erleichtern wird.

* * *

An dieser Stelle sei den Herren Prof. K. F. NOVOBÁTZKY und J. SZAMOSI der Dank des Verfassers ausgesprochen. Die Diskussionen,

die der Verfasser mit ihnen hatte, trugen wesentlich zur Klärung der angestrichelten Probleme bei.

ANHANG

Die Energieverhältnisse des Mesonenfeldes. Der Massendefekt der Atomkerne

Es war zu sehen, dass die Energieverhältnisse der Bewegung im Skalarefeld wesentlich von dem Fall des elektrostatischen Feldes abweichen. (Im elektrostatischen Feld ist z. B. die mechanische Energie des fallenden Körpers trotz der ständigen Geschwindigkeitszunahme konstant.) Die vollständige Klärung dieser neuartigen Verhältnisse ist erst dann möglich, wenn man das Gebiet der Mechanik verlässt und auch die Feldenergie in die Überlegungen einbezieht. Dies soll nun im Anhang erfolgen.

Es sei ein Teilchen angenommen, das sich infolge der gemeinsamen Wirkung des elektromagnetischen Feldes und des skalaren Mesonenfeldes bewegt. Das Wirkungsintegral des Teilchen—elektromagnetisches Feld—Mesonenfeldsystems lautet (in der allgemeinen kovarianten Schreibweise) [9]:

$$S = - \int \left[mc^2 + g \varphi(x) + \frac{e}{c} \varphi_r(x) \frac{dx^r}{d\tau} \right] d\tau - \\ - \frac{1}{8\pi c} \int \frac{1}{2} \left[f_{rs}(y) f^{rs}(y) + g^{rs} \partial_r \varphi(y) \partial_s \varphi(y) + \mu^2 \varphi(y)^2 \right] \sqrt{|Det|g_{ik}|} dy.$$

(Das Integral ist auf die Weltlinie $x^i(\tau)$ des Teilchens bzw. auf den durch Laufkoordinate y durchzogenen vierdimensionalen Raum zu erstrecken.) Die Variation von $x^i(\tau)$ liefert die Gleichung der Weltlinie wie folgt:

$$\frac{d}{d\tau} \left[\left(m + \frac{g\varphi(x)}{c^2} \right) u_i \right] = g^{ik} \left[\frac{e}{c} f_{kr} u^r - g \partial_k \varphi \right]. \quad (1)$$

Die Variation von $\varphi_i(y)$ liefert die Maxwell'schen Feldgleichungen:

$$\nabla_k f^{ik}(y) = \frac{4\pi}{c} e \varrho_0(y) u^i \quad (2)$$

und die Variation von $\varphi(y)$ die Gleichung des Mesonenfeldes:

$$\square \varphi(y) = 4\pi g \varrho_0(y). \quad (3)$$

ϱ_0 bedeutet die invariante (Ruhe-) Teilchendichte:

$$\varrho_0(y) = \varrho(y) \sqrt{1 - v^2/c^2} = \frac{1}{\sqrt{|Det|g_{ik}|}} \frac{1}{c} \int \delta^{(4)}(y - x(\tau)) d\tau. \quad (4)$$

Es sei nun der vollständige Energie-Impuls-Tensor des Systems bestimmt. Dieser lässt sich durch die Variation des metrischen Tensors $g^{ik}(y)$ bilden:

$$\delta S = -\frac{1}{2c} \int T_{ik} \sqrt{\text{Det } |g_{ik}|} \delta g^{ik} dy. \quad (73)$$

Führt man die Berechnung aus und schreibt man T_{ik} sofort mit dem Übergang $ik \rightarrow \delta_{ik}$ auf die kartesische Metrik um, so erhält man:

$$\begin{aligned} T_{ik} = & M_0 u_i u_k + \frac{1}{4\pi} \left[f_{ir} f_{kr} - \frac{1}{4} \delta_{ik} f_{rs} f_{rs} \right] + \\ & + \frac{1}{4\pi} \left[\partial_i \varphi \partial_k \varphi - \frac{1}{2} \delta_{ik} (\partial_r \varphi \partial_r \varphi + \mu^2 \varphi^2) \right]. \end{aligned} \quad (74)$$

Das erste Glied, das sich nur am Ort des Teilchens von Null unterscheidet (Q_0 !), ist der kinetische Energie-Impuls-Tensor T_{ik}^K . Das zweite Glied ist der Energie-Impuls-Tensor des elektromagnetischen Feldes (T_{ik}^E), das dritte der des Mesonenfeldes (T_{ik}^M). Bildet man aus den einzelnen Gliedern die Kraft nach der Gleichung (1), so ergeben sich der Reihe nach folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} - \int \partial_k T_{ik}^K \frac{dt}{d\tau} dV &= - \frac{d}{d\tau} (M u_i), \quad - \int \partial_k T_{ik}^E \frac{dt}{d\tau} dV = \frac{e}{c} f_{ik} u_k, \\ & - \int \partial_k T_{ik}^M \frac{dt}{d\tau} dV = -g \partial_i \varphi. \end{aligned} \quad (75)$$

Aus der Herleitung folgt, dass

$$\partial_k T_{ik} = 0 \quad (76)$$

und dass somit die Summe der drei Beziehungen des Ausdrucks (75) Null beträgt. Diese Summe liefert gerade die Bewegungsgleichung (69).

Die unmittelbare Folge der Gültigkeit der Gleichung (76) ist, dass die aus T_{ik} gebildete Energie konstant ist.

$$\begin{aligned} E' = - \int T_{44} dV &= E + E^E + E^M = \frac{M c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + \frac{1}{8\pi} \int (\mathfrak{E}^2 + \mathfrak{H}^2) dV + \\ & + \frac{1}{8\pi} \int \left[(\text{grad } \varphi)^2 + \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 + \mu^2 \varphi^2 \right] dV = \text{const.} \end{aligned} \quad (77)$$

Nach solchen Vorbereitungen sollen nunmehr die Energieverhältnisse an Hand eines konkreten Beispiels untersucht werden. Es sei ein Teilchen angenommen, das sich — unter Wirkung seiner sehr grossen Masse oder äusserer, fixierender elektromagnetischer Kräfte — dauernd in einem bestimmten Punkt P des Feldes im Ruhezustand befindet. Ein anderes Teilchen (mit kleiner Masse)

bewegt sich infolge der Wirkung des vorigen statischen Mesonenfeldes konstanter Beschleunigung gegen den Punkt P zu. Das bewegte Teilchen ist der Wirkung eines statischen Skalarfeldes ausgesetzt, so dass das Mesonenfeld laut Gleichung (16) keine Energie auf dieses Teilchen überträgt. Die Energie des Teilchens ist trotz der ständigen Geschwindigkeitszunahme unverändert.

Die sich im Mesonenfeld anziehenden Teilchen haben eine gleichnamige (positive) Ladung. Sowohl das ruhende als auch das fallende Teilchen verursachen nach der Gleichung (71) ein gleichnamiges (negatives) Potential. Die Folge davon ist, dass die Feldenergie im gleichen Ausmass, wie sich die beiden Teilchen einander nähern, zunimmt. Es stellt sich nun die Frage, woher diese Energiezunahme gedeckt wird, da sich ja die Teilchengeschwindigkeit ebenfalls erhöht. Die Energie des fallenden Teilchens ist konstant, so dass einzig und allein das ruhende Teilchen in Frage kommen kann. Mit dem Näherkommen des fallenden Teilchens nimmt das Mesonenpotential am Orte des ruhenden Teilchens immer immer grösseren negativen Wert an. Die Energie des ruhenden Teilchens nimmt (infolge der negativen inneren Arbeit) ab. Das Feld verrichtet natürlich auch am bewegten Teilchen eine negative innere Arbeit, doch wird diese dort durch die positive kinetische Arbeit kompensiert. Die Summe der Teilchenenergie und der Feldenergie ist, wie man sich davon leicht durch eine unmittelbare Berechnung überzeugen kann, selbstverständlich konstant.

Die Energiebilanz gestaltet sich infolge der obigen Umstände im Skalarfeld (im Fall von einander anziehenden gleichnamigen Ladungen) ganz anders als im elektromagnetischen Feld (im Fall von einander anziehenden ungleichnamigen Ladungen). Der Unterschied geht augenfällig aus der nachstehenden Zusammenstellung hervor*: Bei der Näherung von zwei einander anziehenden

*Bei der Untersuchung der ungewohnten Energieverhältnisse des Mesonenfeldes stellt sich die Frage, ob die hier vorgeführte Zerlegung des vollständigen Energie-Impuls-Tensors (71) allein möglich ist. Fraglich kann nur die Deutung des mit T_{ik}^K verknüpften Gliedes $gc^{-2} \varrho_0 u_i u_k$ sein, da es ja gleicherweise die für das Teilchen und das Mesonenfeld charakteristischen Angaben enthält. Wenn man den vollständigen Tensor in der Form

$$T_{ik}^K = m \varrho_0 u_i u_k,$$

$$T_{ik}^M = \frac{1}{4\pi} \left[\partial_i \varphi \partial_k \varphi - \frac{1}{2} \delta_{ik} (\partial_r \varphi \partial_r \varphi + \mu^2 \varphi^2) \right] + (gc^{-2} \varrho_0 u_i u_k) \varphi$$

in Teilchen- und Feldgrössen zerlegt, wird das Verhalten der Teilchen- und Feldenergie vollständig mit dem Fall des elektrischen Feldes übereinstimmen. Die innere Arbeit ist Null, die Ruhmassen konstant, und auch im Mesonenfeld tritt die relativistische Massenvergrösserung auf. Aus einer solchen Wahl des Energie-Impuls-Tensors des Mesonenfeldes ergibt sich jedoch die Bewegungsgleichung in der folgenden Form

$$m \frac{du_i}{d\tau} = F_i \equiv - \int \partial_k T_{ik}^M \frac{dt}{d\tau} dV = -g \left(\delta_{ik} + \frac{1}{c^2} u_i u_k \right) \partial_k \varphi - \frac{g\varphi}{c^2} \frac{du_i}{d\tau}.$$

Vergleicht man diese mit der Gleichung (13), so scheint sie sehr gekünstelt zu sein: die Kraft selbst im Falle des allereinfachsten Potentials $\varphi(x)$ eine Funktion der Geschwindigkeit und sogar der Beschleunigung. Deswegen wird hier die Zerlegung in der Form (74) als richtig angesehen. Natürlich hängen konkrete Ergebnisse nur von dem eindeutig vollständigen Energie-Impuls-Tensor T_{ik} ab und nicht von seinen allfälligen Zerlegungen sowie von der Interpretation der einzelnen Glieder.

eilchen gestalten sich die Verhältnisse folgendermassen :

	Bei elektrischer Kraft	Bei mesonischer Kraft
Die Feldenergie	nimmt ab	nimmt zu
Die Energie des fallenden Teilchens	nimmt zu	ist konstant
Die Energie des ruhenden Teilchens	ist konstant	nimmt ab
Gesamtenergie konstant		konstant

* * *

Es sei nun ein quantenmechanisches System von Teilchen betrachtet, das von dem durch den Ausdruck (71) beschriebenen Mesonenfeld zusammengehalten wird. Da der quantenmechanische Grundzustand stationär ist, kann die Gleichung (71) folgenderweise geschrieben werden :

$$\Delta\varphi - \mu^2\varphi = 4\pi g\varrho \sqrt{1-v^2/c^2}. \quad (78)$$

Die gemeinsame Energie der Teilchen und des Mesonenfeldes ist laut der Beziehung (74) :

$$E = \sum_{N=1}^A E(N) + E^M = \sum_1^A \frac{Mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} + \frac{1}{8\pi} \int [(\text{grad } \varphi)^2 + \mu^2 \varphi^2] dV. \quad (79)$$

Bindungsenergie wird hier jene Energie ΔE genannt, die bei der Annäherung der aus dem Unendlichen ohne Anfangsgeschwindigkeit kommenden Teilchen ineinander, beim Ausbau des stabilen, gebundenen Zustandes frei wird. Auf diese Weise ist bei der Berechnung von ΔE bei E' die Summe mc^2 der im freien Zustand gültigen Ruhenergien der das System bildenden Teilchen wegzulassen.

$$\begin{aligned} \Delta E = E' - A mc^2 &= \sum_1^A \left[\frac{Mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - mc^2 \right] + \\ &+ \frac{1}{8\pi} \int [(\text{grad } \varphi)^2 + \mu^2 \varphi^2] dV. \end{aligned} \quad (80)$$

Im zweiten, im Feldenergieglied sei eine partielle Integration ausgeführt und dann der Ausdruck (78) berücksichtigt :

$$\begin{aligned} \Delta E &= \sum_1^A \left(\frac{mc^2 + g\varphi}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - mc^2 \right) - \frac{1}{2} \int g\varrho\varphi \sqrt{1-v^2/c^2} dV = \\ &= \sum_1^A \left[\left(\frac{mc^2 + g\varphi}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - mc^2 \right) - \frac{1}{2} g\varphi \sqrt{1-v^2/c^2} \right]. \end{aligned} \quad (81)$$

Das erste Glied (die um das konstante mc^2 verminderten Teilchenenergie) kann sowohl positiv als auch negativ sein. Das zweite Glied ist die unbedingt positive Feldenergie. Bei kleinen Geschwindigkeiten und einem beliebigen φ

$$\Delta E = \sum_1^A \left[\frac{1}{2} mv^2 + \frac{1}{2} g\varphi \right]. \quad (9)$$

Dies ist der übliche nichtrelativistische Ausdruck für die »kinetische Energie« potentielle Energie«. Es ist jedoch bemerkenswert, dass die nichtrelativistische »potentielle Energie« nicht mit der Feldenergie identisch ist. (Diese potentielle

Energie ergibt sich im Falle von $v^2 \ll c^2$ zu $\sum \left(-\frac{1}{2} g\varphi \right)$.

Im gebundenen Zustand ist die Gesamtenergie des Systems kleiner als die Summe der freien Ruhenergien der das System bildenden Teilchen, also ist ΔE negativ. Die als letztes Glied im Ausdruck (80) stehende Feldenergie ist dagegen unbedingt positiv und grösser als die Summe der Energien des durch die einzelnen gesonderten Teilchen hervorgerufenen Feldes. Dies bedeutet, dass das erste Glied des Ausdrucks (80) bedeutend negativ sein muss. Es ist also ersichtlich, dass sich der für die Bindung charakteristische negative Energiewert im Skalarfeld nicht aus der Feldenergie, sondern aus der Teilchenenergie, genauer aus der unter den konstanten Wert mc^2 abgesunkenen inneren Energie Mc^2 ergibt*.

LITERATUR

1. L. INFELD, Bull. Acad. Polon. Sci., III, 3, 213, 1955.
2. C. MÖLLER, The Theory of Relativity, Clarendon Press, Oxford, 1955.
3. G. MARX und G. SZAMOSI, Bull. Acad. Polon. Sci., III, 2, 475, 1954.
4. K. F. NOVOBÁTZKY, Ann. Phys., 11, 285, 1953.
5. P. E. KUNIN und J. M. TAXAR, Latvijas PSR. Zinatnu Akad. Vestis No. 11, 52, 1951.
6. J. WERLE, Bull. Acad. Polon. Sci., III, 1, 281, 1953.
7. G. SZAMOSI und G. MARX, Acta Phys. Hung., 4, 219, 1954.
8. F. DUIMIO, R. C. Acad. Naz. Lincei, 18, 77, 1955.
9. J. PLEBANSKI und W. SAWICKI, Acta Phys. Polon., 14, 455, 1956.
10. G. MARX, Bull. Acad. Polon. Sci., III, 4, 29, 1956.
11. G. SZAMOSI, Acta Phys. Hung., 5, 463, 1956.
12. G. NORDSTRÖM, Phys. Zs., 13, 1126, 1912.
13. Д. БЛОХИНЦЕВ, Докл. Акад. Наук СССР, 82, 505, 1952.

*Die hier gezogene Folgerung ist für den Fall eines skalaren neutralen Mesonenfeldes gültig. Einige neuere Untersuchungen [21] weisen auf die Wahrscheinlichkeit hin, dass das »schweren Kerne zusammenhaltende »effektive Potentialfeld« in guter Näherung durch ein Skalarfeld beschrieben werden kann. Die innere Arbeit tritt auch im Falle des pseudoskalaren π -Mesonenfeldes auf, auch dort nimmt die Feldenergie die in der Gleichung (79) vorkommende Form an. Man kann sich deshalb vorstellen, dass die vorliegenden Darlegungen — zum Teil oder zur Gänze — auch für Atomkerne Gültigkeit haben. Im Innern des Atomkernes kann die Abnahme der Ruhmasse noch grösser sein, als aus dem Massendefekt hervorgeht. Diese Abnahme hat die positive Feldenergie und die kinetische Energie zu kompensieren, ausserdem hat sie den beobachteten Massendefekt zu liefern. Es ist daher anzunehmen, dass die innere Arbeit, die Abnahme der Ruhmasse bei der Bindung des Atomkernes eine Rolle spielt. Beim Einfang eines Nukleons kann die geleistete innere Arbeit einige MeV ausmachen.

4. T. TAKABAYASI, Progr. Theor. Phys., **9**, 187, 1953.
5. L. BROGLIE, La théorie des particules de spin $1/2$, Gauthier-Villars, Paris, 1951.
6. I. FÉNYES, Vortrag auf der IV. Tagung der Ungar. Physiker, 1955.
7. T. MÁTRAI, Mündl. Mitt.
8. G. SZAMOSI, Acta Phys. Hung., **6**, 207, 1956.
9. J. I. FRENKEL, Zs. Phys., **37**, 273, 1926.
10. P. HAVAS, Phys. Rev., **93**, 1400, 1954.
11. M. H. JOHNSON und E. TELLER, Phys. Rev., **98**, 783, 1955.

ВНУТРЕННЯЯ РАБОТА В РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ДИНАМИКЕ

Г. МАРКС

Р е з ю м е

В работе рассматривается вопрос о релятивистской динамике центра масс в том общем случае, когда четыре компонента силы не зависят друг от друга. В этом случае действие силы может увеличивать энергию центра масс двумя путями: или путем увеличения скорости (кинетическая работа), или же путем увеличения массы покоя (внутренняя работа). В электромагнитном поле наступает только первое, именно в этом случае имеет место явление «релятивистского увеличения массы». В скалярном поле и в других случаях внутренняя работа существенно влияет на протекание явления, может отсутствовать увеличение массы и вместо этого может наступить явление «релятивистского отталкивания» или перешагнутые скорости света. На показанных примерах рассмотрены и новые энергетические отношения. Общее выражение силы дает возможность простого вывода ковариантных принципов вариации.



DETERMINATION OF THE MAGNETIC INTERACTION IN THE H_2 MOLECULE DUE TO THE MOTION OF TWO ELECTRONS

By

J. LADIK

and

MRS. A. CSUKÁS

DEPARTMENT OF CHEMICAL
PHYSICS, TECHNICAL UNIVERSITY,
BUDAPEST

INSTITUTE OF MATHEMATICS OF
THE HUNGARIAN ACADEMY OF
SCIENCES, BUDAPEST

(Presented by I. Kovács. — Received 13. III. 1956)

An approximative method is given for the wave-mechanical calculation of the magnetic interaction energy due to the motion of two electrons. The method is applied to the case of the H_2 molecule. By using WANG's approximation for the eigenfunctions and retaining his values for the parameters, an energy of $8,24 \cdot 10^{-4}$ eV was obtained. This value agrees in magnitude with that calculated from the nuclear spin — nuclear spin magnetic interaction of H_2 , and is about 60% of the electron spin — electron spin interaction energy as calculated for He, it is greater, however, by one order of magnitude than the magnetic interaction energy of the He atom resulting from the motion of the two electrons as calculated from the more accurate, retarded energy expression.

In the course of the investigation it became necessary to determine two centre integrals which are as yet unknown in the literature. Their calculation is given in the appendix.

I. Method for the wave-mechanical calculation of magnetic interaction caused by the motion of two electrons

It is common knowledge that from BREIT's equation [10b] finer interactions between two electrons can be deduced, accurate to the order of $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ but that the determination of all the energy terms is mathematically rather complicated. Nevertheless, these calculations were performed for the triplet state of He and He-like ions by BREIT [10b], and for the ground state by ERIKSSON, resp. SUCHER and FOLEY [15a]. As far as we are aware, it has never been attempted to apply BREIT's equation to two-centre problems, probably because of the great mathematical difficulties which are to be expected.

In the following we describe, within the framework of non-relativistic quantum mechanics, a simplified method for the wave-mechanical calculation of the magnetic interaction energy due to the motion of two electrons. This method can be readily applied to the case of the H_2 molecule.

The classical magnetic interaction energy between two moving electrons is known to be given by

$$T_m = -\frac{1}{c^2} \frac{e_0^2}{r_{12}} (\dot{\mathbf{r}}_1 \dot{\mathbf{r}}_2), \quad (1)$$

where e_0 is the elementary charge, and r_{12} the distance of electrons moving with

velocities \dot{r}_1 and \dot{r}_2 . Both these velocities refer of course to the same system coordinates.

Equation (1) contains the following simplifications :

a) The expression for the vector potential used in deducing equation (1) is not retarded, but this does probably not cause deviation in the order of magnitude [cf. 10a] for electrons not too far from each other.

b) The vector potential itself has been deduced on the assumption [10a] that the electrons are moving without acceleration and therefore are not radiating. Since we propose to use equation (1) for the determination of the interaction between electrons moving in stationary orbits, and since contrary to classical theory, it is a fundamental theorem of quantum mechanics that electrons in stationary orbits are not radiating, we feel that this approximation is allowed.

c) In the denominator of equation (1) r_{12} itself is an approximation instead of which s ought to stand given by

$$s = \sqrt{x_{12}^2 + (1 - \beta^2)(y_{12}^2 + z_{12}^2)} ,$$

where x_{12}, \dots is the difference of the two sets of electron coordinates x, \dots being $\frac{v}{c}$ [12]. Because in Bohr's theory of the H atom the velocity of the electron in the first Bohr orbit is of the order of $v \approx 10^8$ cm/sec, i. e., two magnitudes smaller than the light velocity c , for electrons moving in an atomic system the factor $(1 - \beta^2)$ deviates but very slightly from unity. So this approximation cannot cause any substantial error.

The use of the retarded expression [10a] corresponding to (1) would probably furnish more accurate results, wherefore the following calculation of the magnetic interaction energy on the grounds of equation (1) can only be regarded as a first approximation necessitated by mathematical difficulties.

The energy term (1) cannot be incorporated in the time-independent Schrödinger equation as a potential energy, for T_m depends on the electron velocities and, if it were treated as a potential energy, it would make the potential energy V too, time dependent. On the other hand, the time-independent Schrödinger equation for the stationary case is only valid, if the Hamiltonian H is equal to the total energy of the system ($H = T + V = E$). But this condition is not fulfilled unless the system is conservative and scleronomic, i. e., unless the potential energy depends solely on the coordinates, and the kinetic energy T is a homogeneous quadratic form of the velocities [3].

To overcome this difficulty, T_m must be regarded as a kinetic energy term when the total kinetic energy for two electrons will be

$$T = T_k + T_m ,$$

here

$$T_k = \frac{m_0 \dot{r}_1^2}{2} + \frac{m_0 \dot{r}_2^2}{2}$$

and

$$T_m = -\frac{1}{c^2} \frac{e_0^2}{r_{12}} (\dot{r}_1 \dot{r}_2),$$

m_0 being the electron mass, and e_0 the charge.

The generalized momenta will be

$$\underline{p}_1 = m_0 \dot{r}_1 - \frac{1}{c^2} \frac{e_0^2}{r_{12}} \dot{r}_2 \quad (4)$$

and

$$\underline{p}_2 = m_0 \dot{r}_2 - \frac{1}{c^2} \frac{e_0^2}{r_{12}} \dot{r}_1.$$

Expressing the velocities \dot{r}_1 and \dot{r}_2 , on the basis of equation (4), as functions of \underline{p}_1 and \underline{p}_2 , and substituting the relations so obtained into equation (3), it will be found after simple calculations that for two point charges of the same charge e , but of different masses m_1 and m_2

$$T = \frac{m_2 \underline{p}_1^2 + m_1 \underline{p}_2^2 + 2 \frac{e^2}{c^2 r_{12}^2} (\underline{p}_1 \underline{p}_2)}{2 \left(m_1 m_2 - \frac{e^4}{c^4 r_{12}^2} \right)}. \quad (5)$$

For two electrons, naturally, $m_1 = m_2 = m_0$, and $e = e_0$. Substituting the wave-mechanical operators, $\underline{p}_1 = \frac{h}{2\pi i} \text{grad}_1$ and $\underline{p}_2 = \frac{h}{2\pi i} \text{grad}_2$ into equation (5), we find the following operator for the kinetic energy:

$$T = \frac{-m_2 \frac{h^2}{8\pi^2} \Delta_1 - m_1 \frac{h^2}{8\pi^2} \Delta_2 - 2 \frac{e^2}{c^2 r_{12}} \frac{h^2}{8\pi^2} \Delta_{12}}{m_1 m_2 - \frac{e^4}{c^4 r_{12}^2}}, \quad (6)$$

where

$$\Delta_{12} = \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1 \partial z_2}.$$

¹ For this form of equation (6) thanks are due to T. MÂTRAI.

Applying equation (6) to the case of two electrons, and expressing in atomic units, we have

$$T = \frac{-\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{2} \Delta_2 - \frac{1}{c^2} \frac{\Delta_{12}}{r_{12}}}{1 - \frac{1}{c^4 r_{12}^2}}.$$

In the following, the second term of the denominator will be neglected, owing to its smallness ($c = 137,3$ at. u., the average of r_{12} , $\tilde{r}_{12} = 1,4$ at. u.). Thus we can separate T into two terms

$$T = T_k + T_m,$$

the corresponding operators being

$$T_k = -\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2)$$

and

$$T_m = -\frac{1}{c^2} \frac{\Delta_{12}}{r_{12}}.$$

It should be noted that equation (9) deduced in the above manner is in complete agreement with the energy term of the above interaction in the relativistic, but non-retarded two-electron equation of EDINGTON and GALLAGHER [10b].

We have thus arrived at our time-independent Schrödinger equation comprising also the magnetic interaction of the electrons,

$$\begin{aligned} H\psi = (T + V)\psi &= \left[-\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{1}{c^2} \frac{\Delta_{12}}{r_{12}} + V \right] \psi = E\psi, \\ -\frac{1}{2} (\Delta_1 \psi + \Delta_2 \psi) - \frac{1}{c^2} \frac{\Delta_{12} \psi}{r_{12}} + V\psi &= E\psi, \end{aligned}$$

respectively.

II. Application of the method to the H_2 molecule

We used the method described in the foregoing for the determination of the magnetic interaction energy between the electrons of the H_2 molecule.

used by the motion of the electrons. In the calculation WANG's approximate wave function was used:

$$\psi = \psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_a(2) \psi_b(1), \quad (11)$$

where

$$\psi_a(i) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_{ai}}; \quad \psi_b(i) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_{bi}} \quad (i=1,2)$$

and r_{ai} and r_{bi} represent the distance of the i -th electron from proton a and b , respectively. The value of parameter α is 1.17 for a nuclear separation of $R = 1.40$ at. u.

The energy of the H_2 molecule is given by

$$\bar{H} = \frac{\int \psi^* H \psi dV_1 dV_2}{\int \psi^* \psi dV_1 dV_2}, \quad (12)$$

where H is the Hamiltonian operator for the molecule.

If in this expression equation (9) is also taken into account, then

$$H = H^1 + H^2, \quad (13)$$

where H^1 is the Hamiltonian operator without the magnetic term, and

$$H^2 = -\frac{1}{c^2} \frac{A_{12}}{r_{12}},$$

wherefrom it is at once obvious that on substituting equation (13) into equation (12), \bar{H} also separates into two terms:

$$\bar{H} = \bar{H}^1 + \bar{H}^2. \quad (14)$$

It now remains to calculate the expression

$$\bar{H}^2 = -\frac{1}{c^2} \frac{\int \psi^* \frac{A_{12}}{r_{12}} \psi dV_1 dV_2}{\int \psi^* \psi dV_1 dV_2}. \quad (15)$$

Remembering the symmetrical expression of the eigenfunction in equation (11), and making use of the following relations, provable in an elementary way,

$$\begin{aligned}
 J_I &= \int \psi_a(1) \psi_b(2) \frac{A_{12}}{r_{12}} [\psi_a(1) \psi_b(2)] dV_1 dV_2 = \\
 &= \int \psi_a(2) \psi_b(1) \frac{A_{12}}{r_{12}} [\psi_a(2) \psi_b(1)] dV_1 dV_2, \\
 J_{II} &= \int \psi_a(1) \psi_b(2) \frac{A_{12}}{r_{12}} [\psi_a(2) \psi_b(1)] dV_1 dV_2 = \\
 &= \int \psi_a(2) \psi_b(1) \frac{A_{12}}{r_{12}} [\psi_a(1) \psi_b(2)] dV_1 dV_2
 \end{aligned}$$

equation (15) will be transformed into

$$\bar{H}^2 = -\frac{1}{c^2} \frac{2(J_I + J_{II})}{\int \psi^* \psi dV_1 dV_2} = -\frac{1}{c^2} \frac{J_I + J_{II}}{1 + s^2},$$

where

$$s^2 = \left| \int \psi_a(1) \psi_b(1) dV_1 \right|^2 = e^{-2\alpha R} \left(1 + \alpha R + \frac{1}{3} \alpha^2 R^2 \right)^2.$$

It can be seen that integrals J_I and J_{II} are the Coulomb and exchange integrals of the magnetic interaction term. At first, their calculation seems to present substantial mathematical difficulties, since two-centre integrals of this type are unknown in the literature. Yet, by expressing the wave functions in Cartesian coordinates, performing the derivations, and thereafter changing over to elliptic coordinates, we have succeeded in reducing integrals J_I and J_{II} to types treated in the literature [1, 7, 14, 16, 18], and thus in expressing them as functions of parameters α and R . Details of this calculation are given in Appendix.

Substituting WANG's values for the parameters ($\alpha = 1.17$, $R = 1$ at. u.) into the formula of J_I and J_{II} , respectively, we obtain

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{c^2} J_I &= 1.34 \cdot 10^{-3} \text{ eV}, \\
 -\frac{1}{c^2} J_{II} &= -1.37 \cdot 10^{-4} \text{ eV}.
 \end{aligned}$$

By the substitution of these values into equation (17) we ultimately get the magnetic interaction energy

$$T_m = \bar{H}_{\min}^2 = 8.24 \cdot 10^{-4} \text{ eV}.$$

The error in the spectroscopic determination of the binding energy of the H_2 molecule being $\pm 6 \text{ cm}^{-1}$, which corresponds to about $6 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$, the ultimately obtained energy is of about the same order of magnitude as is the uncertainty in the measured value of the binding energy.²

In these circumstances, it seemed unwarranted to repeat WANG's variational calculation with the added H^2 term, because this probably would in no way have influenced the values for α , R , and the binding energy ($\varepsilon = 3.76 \text{ eV}$ in WANG's work), and would only have affected the numerical value of T_m , but not its order of magnitude. We made trials with a fixed R (1.40 at. u.) and with $\alpha = 1.16$, resp. 1.18, and found T_m to be $3.24 \cdot 10^{-4}$ and $2.31 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$, respectively. Obviously, then, with $R = 1.40$, T_m does assume its extreme for $\alpha = 1.17$, and variation of the parameters merely changes numerical values, but not orders of magnitude. The determination of T_m with the original values of SUGIURA ($R = 1.64$, $\alpha = 1.00$) gave $8.68 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$ which is in practical agreement with equation (19).

Attention must still be paid to the apparent contradiction that while, according to quantum mechanics, the magnetic moment of the $1s$ electrons in hydrogenlike atoms is zero, and therefore the magnetic interaction energy between the orbital momenta is expected to be likewise zero, the value resulting for T_m is nonetheless different from zero. This is probably due to the fact that, because of their mutual interaction and the action on them of the nuclei, the $1s$ electrons with initially spherically symmetrical wave functions are perturbed in the H_2 molecule. This perturbation destroys the symmetry and enables the $1s$ electrons moving in the field of the two nuclei to acquire a magnetic moment different from zero. The situation may be conceived of as one similar to one of the causes of the van der Waals forces, namely, the induction effect, where molecules which are initially not dipoles induce dipoles in, and attract one another.³

$$\varepsilon = D_0^0 + G_0'' \quad (20)$$

In this expression of the binding energy ε , D_0^0 denotes the dissociation energy, and G_0'' the zero point energy. According to BEUTLER and JÜNGER [2], $D_0^0 = 36\,100 \pm 40 \text{ cm}^{-1}$ and $G_0'' = 2174 \text{ cm}^{-1}$, but according to HERZBERG, $D_0^0 = 36\,100 \pm 6 \text{ cm}^{-1}$ [6].

So we have:

$$\varepsilon = 38\,274 \pm 40 \text{ cm}^{-1} \text{ (resp. } \pm 6 \text{ cm}^{-1}) \approx 4.74 \text{ eV}.$$

It should be noted, that the literature generally gives the calculated value of the binding energy of the H_2 molecule to two decimals.

³ The authors hold that if the wave functions are interpreted, with M. BORN, statistically, that is, if the electrons are regarded as electrically charged mass points, the fact that the magnetic moment, due to the motion of the $1s$ electron in a hydrogenlike atom, and the current density, respectively, is equal to zero, does not mean that that electron does not move in relation to the nucleus; it merely indicates a uniform probability, as given by the wave function, of finding it anywhere on the surface of a sphere with radius r , making the time average of the orbital magnetic moment zero. It is now easy to imagine a motion of zero average magnetic moment but with non-vanishing individual momenta, and then it is at once understandable that the time average of the magnetic interaction energy arising in two electrons of such motion can, after all, be non-zero. In this manner, in our opinion, the energy term (9) could also appear even if the $1s$ electrons were not perturbed in the H_2 molecule.

The magnetic interaction energy in the H_2 molecule due to the motion of the two electrons can also be estimated along classical lines.

Substituting in the formula :

$$T_m = -\frac{1}{c^2} \frac{e_0^2}{r_{12}} \dot{r}_1 \dot{r}_2$$

$\tilde{r}_{12} = R = 1,40$ at. u. for the average of r_{12} , for the average velocity $\tilde{r}_1 = \tilde{r}_2 = 1,00$ at. u. (this being the electron velocity in the first Bohr orbit), $c = 137$ and $\cos \vartheta = -1$ (i. e. supposing that the electrons so to say avoid each other [5]) we find

$$T_m = -\frac{1}{c^2} \frac{e_0^2}{\tilde{r}_{12}} \cdot \tilde{r}_1 \tilde{r}_2 \cos \vartheta = -\frac{1}{(137,3)^2} \cdot \frac{1}{1,40} \cdot 1 \cdot 1 \cdot (-1) =$$

$$= 3,77 \cdot 10^{-5} \text{ at. u. } \approx 1 \cdot 10^{-3} \text{ eV.}$$

It can be seen that this value agrees both in sign and magnitude with the quantum mechanical value.

For lack of appropriate experimental data, our result obtained in equation (19) cannot be compared directly with experience. Energies of the order of 10^{-3} eV correspond to microwaves of about 1 mm wavelength, but in this region the microwave spectrum of the H_2 molecule has not yet been determined [4].

Though at present still impracticable, there are two ways we would suggest in principle, by which to check the value of T'_m experimentally. One suggestion is this: if it were possible to measure the binding energy of the H_2 molecule to an accuracy of 1 cm^{-1} ($\pm 10^{-4}$ eV) and to continue the JAMES-COOLIDGE calculation [7] by using further terms of the wave function, so that the convergence of the value of the binding energy were determined with an accuracy of 10^{-4} eV, then one fourth of the difference between the two values so obtained ought to give the value of T'_m calculated in the foregoing (taking the spin — spin magnetic interaction and the magnetic interaction between the magnetic moment resulting from the motion of one electron and the spin of the other electron to equal (19) further, neglecting the magnetic interaction energies with nuclear spins, and also the relativistic effects).

As regards the second suggestion it is known that, because the time average of the total angular (orbital and spin), and therefore also the average of the magnetic momenta of the two electrons is zero, the very small Zeeman splitting up of the $^1\Sigma$ ground state of the H_2 molecule is only the consequence of the magnetic moment produced by the rotational motion of the molecule.

and that connected with the nuclear spins [6]. In a field of $H = 3600$ Oersted, at the $j = 1$ rotational level, with the aid of the molecular beam magnetic resonance method, in the radiofrequency region at $8 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ ($\sim 10^{-9} \text{ eV}$), RAMSEY [13] observed frequencies that correspond to the transitions between the individual levels of the Zeeman splittings due to the rotational motion of the H_2 molecule.

KELLOG, RABl, RAMSEY and ZACCHARIAS [8] observed transitions between the H_2 hyperfine Zeeman levels in the rotational state $J=1$ at 10^{-3} cm^{-1} ($\sim 10^{-7} \text{ eV}$), in a field of $H = 10\,000$ Oersted. For a more detailed discussion of the spectrum observed, it became necessary, among others, to take into consideration the energy which is due to the magnetic interaction between the nuclear spins. The following formula was deduced [8]

$$W_s^{(1.)} = a_{TIj} \frac{\tilde{\mu}_I^2}{r^3} [3 M_j^2 - j(j+1)] [3 M_T^2 - T(T+1)], \quad (21)$$

where a_{TIj} denotes a numerical constant, r the nuclear separation, $\tilde{\mu}_I = g_I T \mu_{\text{N}}$ a numerical constant, μ_{N} the nuclear magneton, T the resulting nuclear spin of the two nuclei, j the angular momentum of the molecule caused by its rotation, and M_T and M_j denote its respective components along the direction of the field.

To be of the same order of magnitude as the energies in the expression (19), the energies of the transition between the above Zeeman levels must be increased at least thousandfold. Because the energies corresponding to the individual Zeeman transitions are linearly dependent on the external magnetic field, the above data would specify a field of 10^3 to 10^6 Oersteds. Obviously, then, (19) cannot possibly be controlled in this manner. Besides, since in the Zeeman splitting up it is the time average of the component of the magnetic moment in the direction of the field which interacts with the external field, the energy term similar to (21) would in our case most probably vanish and, accordingly, the interaction investigated could not be determined from the spectrum produced by the microwave Zeeman transition of the ground state.

On the other hand, equation (21) enables us to estimate the magnetic interaction energy (19) indirectly, by starting from experimental data. If a change in the nuclear spin - nuclear spin interaction energy, which might possibly be caused by the external field, is neglected and (21) is so regarded as equalling the magnetic interaction energy of nuclear spins in the H_2 molecule; if, further, the magnetic interaction energy between electron spins is assumed to equal the magnetic interaction energy caused by the motion of the electrons, and both to be the 1847²-fold of the nuclear spin magnetic interaction energy, then the following simple calculation can be performed.

In the formula

$$W_s^{(1)} = a_{Tlj} \frac{\tilde{\mu}_I^2}{r^3} [3 M_j^2 - j(j+1)] [3 M_T^2 - T(T+1)]$$

we substitute $j = 1$, $M_j = 1$, $T = 1$ (parallel nuclear spins), $M_T = 1$, and KELLOG and coworkers' data

$$a_{Tlj} = \frac{2}{5}, \quad H'' = \frac{\tilde{\mu}_I}{r^3} = 34,1 \text{ Oersted}, \quad \tilde{\mu}_I = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Gauss cm}^3$$

we get

$$\begin{aligned} W_s^{(1)} &= \frac{2}{5} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 34,1 [3 - 1(1+1)] [3 - 1(1+1)] = \\ &= \frac{2}{5} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 34,1 = 1,88 \cdot 10^{-22} \text{ erg.} = 1,17 \cdot 10^{-10} \text{ eV} \end{aligned}$$

and ultimately

$$T_m = 1,17 \cdot 10^{-10} \cdot 1 \cdot 847^2 \cdot 10^6 = 3,11 \cdot 10^{-4} \text{ eV.}$$

This value, as can be seen, agrees with (19) both in sign and in magnitude.

ERIKSSON [15a], who with the use of BREIT's equation calculated for the He atom the value of the magnetic interaction energy due to the motion of the two electrons, found it to be $0,88 \text{ cm}^{-1}$ ($\sim 9 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$). The discrepancy between his value and the one in our equation (19), which is of an entire order of magnitude, is probably due partly to the difference between the He and H problems, and partly, probably, to the use in our calculation of the non-retarded expression (1).

SESSLER and FOLEY [15], on the other hand, determined for He the magnetic interaction between electron spins, and found it to be 16 cm^{-1} ($\sim 1,4 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$).

SUCHER and FOLEY [15a] again calculated this interaction energy term using the BREIT operator, and for hydrogenlike eigenfunctions found it to be 14 cm^{-1} ($\sim 1,4 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$). Our value (19) is about 60% of this.⁴

Acknowledgements

The authors wish to express their sincere thanks to Academician G. SCHAY for his valuable advice and criticism; to Candidate T. MÁTRAI, who directed our attention to the problem, initiated the present investigation, and kindly gave continuous useful advice; to Prof. R. GÁSPÁR for his valuable assistance on the physical side of our work and to Candidates G. FREUD and F. BERENCZ, who helped with the mathematical problems.

⁴ It should be noted that by using Hylleraas eigenfunctions with three parameters SUCHER and FOLEY found 8 cm^{-1} ($\sim 8 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$). The agreement of this value with that of (19), which latter had been calculated with hydrogenlike eigenfunctions, should be attributed to chance.

APPENDIX

For the determination of the magnetic interaction energy between the electrons of the H_2 molecule we have to calculate the integrals

$$\begin{aligned} J_I &= \int \psi_a(1) \psi_b(2) \frac{A_{12}}{r_{12}} [\psi_a(1) \psi_b(2)] dV_1 dV_2 = \\ &= \int \psi_a(2) \psi_b(1) \frac{A_{12}}{r_{12}} [\psi_a(2) \psi_b(1)] dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (22)$$

and

$$\begin{aligned} J_{II} &= \int \psi_a(1) \psi_b(2) \frac{A_{12}}{r_{12}} [\psi_a(2) \psi_b(1)] dV_1 dV_2 = \\ &= \int \psi_a(2) \psi_b(1) \frac{A_{12}}{r_{12}} [\psi_a(1) \psi_b(2)] dV_1 dV_2, \end{aligned} \quad (23)$$

where

$$\psi_a(i) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_{a_i}}; \quad \psi_b(i) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_{b_i}} \quad (i=1,2)$$

and

$$A_{12} = \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1 \partial z_2}.$$

Let us now perform the derivations under the integral and introduce the elliptic coordinates

$$\mu_i = \frac{r_{a_i} + r_{b_i}}{R}; \quad \nu_i = \frac{r_{a_i} - r_{b_i}}{R}; \quad \varphi_i \quad (i=1,2)$$

and replace $\frac{1}{r_{12}}$ by a NEUMANN series [11]

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{2}{R} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} D_k^j P_k^j \left(\frac{\mu_1}{\mu_2} \right) Q_k^j \left(\frac{\mu_2}{\mu_1} \right) P_k^j(\nu_1) P_k^j(\nu_2) \cos j(\varphi_1 - \varphi_2),$$

where $P_k^j(\mu_i)$ and $Q_k^j(\mu_i)$ are associated Legendre functions [9] of the first and second kind, respectively. Substituting the elliptic coordinates and the NEUMANN series under the integral, we get

$$J_I = \frac{\alpha^3 \varrho^5}{32 \pi^2 c^2} \int_1^\infty \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} e^{-\varrho(\mu_1 + \mu_2 + \nu_1 + \nu_2)} \left\{ (\mu_1^2 - 1)(1 - \nu_1^2)(\mu_2^2 - 1)(1 - \nu_2^2) \right\}^{1/2} \cdot \\ \cdot \cos(\varphi_2 - \varphi_1) + \mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2 - \mu_1 \nu_1 + \mu_2 \nu_2 - 1 \left\{ (\mu_1 - \nu_1)(\mu_2 + \nu_2) \right. \\ \cdot \sum_{k=0}^\infty \sum_{j=0}^\infty D_k^j P_k^j \left(\frac{\mu_1}{\mu_2} \right) Q_k \left(\frac{\mu_2}{\mu_1} \right) P_k^j(\nu_1) P_k^j(\nu_2) \cos j(\varphi_2 - \varphi_1) d\mu_1 d\mu_2 d\nu_1 d\nu_2 d\varphi_1 d\varphi_2 \cdot$$

and

$$J_{II} = \frac{\alpha^3 \varrho^5}{32 \pi^2 c^2} \int_1^\infty \int_{-1}^{+1} \int_0^{2\pi} e^{-\varrho(\mu_1 + \mu_2)} \left\{ [(\mu_1^2 - 1)(1 - \nu_1^2)(\mu_2^2 - 1)(1 - \nu_2^2)]^{1/2} \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \right. \\ \left. - \mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2 - \mu_1 \nu_1 + \mu_2 \nu_2 + 1 \right\} (\mu_1 - \nu_1)(\mu_2 + \nu_2) \cdot \\ \cdot \sum_{k=0}^\infty \sum_{j=0}^\infty D_k^j P_k^j \left(\frac{\mu_1}{\mu_2} \right) Q_k^j \left(\frac{\mu_2}{\mu_1} \right) P_k^j(\nu_1) P_k^j(\nu_2) \cos j(\varphi_2 - \varphi_1) d\mu_1 d\mu_2 d\nu_1 d\nu_2 d\varphi_1 d\varphi_2 \cdot$$

where

$$\varrho = \alpha R$$

and

$$P_k^j \left(\frac{\mu_1}{\mu_2} \right) = \begin{cases} P_k^j(\mu_1), & \text{if } \mu_2 > \mu_1, \\ P_k^j(\mu_2), & \text{if } \mu_2 < \mu_1. \end{cases} \\ Q_k^j \left(\frac{\mu_1}{\mu_2} \right) = \begin{cases} Q_k^j(\mu_1), & \text{if } \mu_2 > \mu_1, \\ Q_k^j(\mu_2), & \text{if } \mu_2 < \mu_1. \end{cases}$$

Integral J_I may be expressed as the sum of two series

$$\sum_{k=0}^\infty (2k+1) H_k(m, n, \varrho) G_k(m, \varrho) K_k(n, \varrho) \quad (2)$$

and

$$\sum_{k=1}^\infty \frac{2(2k+1)}{[k(k+1)]^2} H_k^1(m, n, \varrho) G_k^1(m) K_k^1(n). \quad (2)$$

Similarly, J_{II} may be expressed by the series:

$$\sum_{k=0}^\infty (2k+1) H_k(m, n, \varrho) R_k(m) R_k(n) \quad (2)$$

nd

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{2(2k+1)}{[k(k+1)]^2} H_k^1(m, n, \varrho) R_k^1(m) R_k^1(n). \quad (27)$$

The quantities appearing in the sums (24) and (26) are the following:

$$\begin{aligned} H_k(m, n, \varrho) &= \int_1^{\infty} Q_k(\mu_1) \mu_1^m e^{-\varrho \mu_1} d\mu_1 \int_1^{\mu_1} e^{-\varrho \mu_2} \mu_2^n P_k(\mu_2) d\mu_2 + \\ &+ \int_1^{\infty} Q_k(\mu_1) \mu_1^n e^{-\varrho \mu_1} d\mu_1 \int_1^{\mu_1} e^{-\varrho \mu_2} P_k(\mu_2) \mu_2^m d\mu_2; \\ R_k(n) &= \int_{-1}^{+1} v^n P_k(v) dv; \\ G_k(n, \varrho) &= \int_{-1}^{+1} v^n e^{-\varrho v} P_k(v) dv; \\ K_k(n, \varrho) &= \int_{-1}^{+1} v^n P_k(v) e^{\varrho v} dv. \end{aligned}$$

These integrals are known in the literature [1, 7, 14, 16, 18].

The quantities occurring in (25) and (27) are these:

$$\begin{aligned} H_k^1(m, n, \varrho) &= \int_1^{\infty} \mu_1^m \mu_2^n e^{-\varrho(\mu_1 + \mu_2)} [(\mu_1^2 - 1)(\mu_2^2 - 1)]^{1/2} P_k^1\left(\frac{\mu_1}{\mu_2}\right) Q_k^1\left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right) d\mu_1 d\mu_2; \\ G_k^1(n, \varrho) &= \int_{-1}^{+1} e^{-\varrho v} v^n [(1 - v^2)]^{1/2} P_k(v) dv; \\ K_k^1(n, \varrho) &= \int_{-1}^{+1} e^{\varrho v} v^n [(1 - v^2)]^{1/2} P_k(v) dv; \\ R_k^1(n, \varrho) &= \int_{-1}^{+1} v^n [(1 - v^2)]^{1/2} P_k(v) dv. \end{aligned}$$

These integrals can be reduced to the previously treated type by making use of the properties of the Legendre polynomials. At last we get for integrals J_I and J_{II} :

$$\begin{aligned}
 J_1 = & \frac{\alpha^3 \varrho^5}{32 c^2} \left[\sum_{k=0}^{\infty} 4(2k+1) \{ \text{tr}(H_k(2,2, \varrho) - H_k(2,0, \varrho) - H_k(0,2, \varrho) - \right. \\
 & - H_k(0,0, \varrho)) + t(s-p)(H_k(1,0, \varrho) - H_k(1,2, \varrho)) + \\
 & + (w(s-p) - l(s+p))H_k(1,1, \varrho) - r(l+t)H_k(0,1, \varrho) \} - \\
 & \left. - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2k+1}{[k(k+1)]^2} \{ p^1(l^1 H_k^1(1,1, \varrho) + t^1 H_k^1(1,0, \varrho)) - \right. \\
 & \left. - r^1(l^1 H_k^1(1,0, \varrho) + t^1 H_k^1(0,0, \varrho)) \} \right],
 \end{aligned}
 \quad (2)$$

where

$$K_k(0, \varrho) = l; \quad K_k(1, \varrho) = t; \quad K_k(2, \varrho) = w;$$

and

$$G_k(0, \varrho) = p; \quad G_k(1, \varrho) = r; \quad G_k(2, \varrho) = s,$$

$$K_k^1(1, \varrho) = t^1; \quad w^1; \quad l^1; \quad p^1; \quad r^1; \quad s^1$$

are of similar meaning.

$$\begin{aligned}
 J_{11} = & \frac{\alpha^3 \varrho^5}{c^2} \left\{ \frac{1}{50} H_3(0,0, \varrho) - \frac{1}{10} H_2(1,1, \varrho) - \right. \\
 & \left. - \frac{23}{150} H_1(0,0, \varrho) + \frac{1}{3} H_1(0,2, \varrho) + \frac{1}{6} H_0(1,1, \varrho) \right\}.
 \end{aligned}
 \quad (2)$$

In order to prove the convergence of the series expansion of J_1 , we need estimate the terms in the series of type (24). Integral $G_k(n, \varrho)$ can be estimated by using the orthogonality of $P_k(\nu)$ to any polynomial of an order lower than k and the uniform convergence of the series

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-\varrho)^l}{l!} \nu^l.$$

The calculation proceeds as follows:

$$\begin{aligned}
 & \left| \int_{-1}^{+1} \nu^n e^{-\varrho \nu} P_k(\nu) d\nu \right| = \left| \int_{-1}^{+1} \nu^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-\varrho)^l}{l!} \nu^l P_k(\nu) d\nu \right| = \\
 & = \left| \int_{-1}^{+1} \sum_{l=k-n}^{\infty} \frac{(-\varrho)^l}{l!} \nu^{l-n} P_k(\nu) d\nu \right| \leq \int_{-1}^{+1} \sum_{l=k-n}^{\infty} \frac{\varrho^l}{l!} d\nu < 2 \frac{\varrho^{k-n}}{(k-n)!} \cdot \frac{1}{1 - \frac{\varrho}{k-n+1}} \\
 & < 2 \frac{\varrho^{k-n}}{(k-n)!}.
 \end{aligned}$$

$Q_k(m, n, \varrho)$ can be estimated in the following manner. Let us inspect the integral

$$\int_1^\infty Q_k(\mu_1) \mu_1^m e^{-\varrho\mu_1} d\mu_1 \int_1^{\mu_1} e^{-\varrho\mu_2} \mu_2^n P_k(\mu_2) d\mu_2. \quad (30)$$

using the asymptotic formula of the Legendre functions [9] i. e., the relation

$$|Q_n(\xi)| < c_0 \frac{1}{(\xi + \sqrt{\xi^2 - 1})^{n+1}} \cdot \frac{1}{2[1 + \xi\sqrt{\xi^2 - 1 - \xi^2}]}$$

valid for a $\xi > 1$, where

$$C_0 = \frac{2^{n+1} \cdot n!}{1.3.5 \dots (2n+1)}.$$

by Stirling's formula

$$|Q_n(\xi)| < (1 + \varepsilon) \sqrt{\frac{\pi}{n}} \cdot \frac{1}{(\xi + \sqrt{\xi^2 - 1})^{n+1} \cdot 2(1 + \xi\sqrt{\xi^2 - 1 - \xi^2})}, \quad (31)$$

where $\xi > 1$ and $n > N(\varepsilon)$. A similar asymptotic formula applies to $P_n(\xi)$

$$|P_n(\xi)| < \frac{1 + \varepsilon'}{\sqrt{1 - z} \sqrt{\pi n} z^n}, \quad (32)$$

$$n > N(\varepsilon')$$

and

$$\sqrt{z} = \xi - \sqrt{\xi^2 - 1} = \frac{1}{\xi + \sqrt{\xi^2 - 1}}.$$

In integral (30) we select a value $\delta > 1$, for which

$$\left| \int_1^\delta Q_k(\mu_1) e^{-\varrho\mu_1} \mu_1^m d\mu_1 \int_1^{\mu_1} e^{-\varrho\mu_2} \mu_2^n P_k(\mu_2) d\mu_2 \right| < 1.$$

on the other hand,

$$\begin{aligned} & \left| \int_\delta^\infty e^{-\varrho\mu_1} \mu_1^m Q_k(\mu_1) d\mu_1 \int_1^{\mu_1} e^{-\varrho\mu_2} \mu_2^n P_k(\mu_2) d\mu_2 \right| < \\ & < \left| \int_\delta^\infty e^{-\varrho\mu_1} \mu_1^m Q_k(\mu_1) d\mu_1 \int_1^\infty e^{-\varrho\mu_2} \mu_2^n P_k(\mu_2) d\mu_2 \right|. \end{aligned}$$

Treating separately the two integrals which appear here, from (31) (32), we have

$$\begin{aligned}
 \left| \int_{\delta}^{\infty} e^{-\varrho \mu_1} \mu_1^m Q_k(\mu_1) d\mu_1 \right| &\leq \int_{\delta}^{\infty} e^{-\varrho \mu_1} \mu_1^m \frac{c_0}{(\mu_1 + \sqrt{\mu_1^2 - 1})^{k+1}} \\
 &\cdot \frac{1}{2(1 + \mu_1 \sqrt{\mu_1^2 - 1} - \mu_1^2)} d\mu_1 < \int_{\delta}^{\infty} e^{-\varrho \mu_1} \mu_1^m \frac{2 \sqrt{\frac{\pi}{k}}}{(\delta + \sqrt{\delta^2 - 1})^{k+1}} \\
 &\cdot \frac{1}{2(1 + \mu_1 \sqrt{\mu_1^2 - 1} - \mu_1^2)} d\mu_1 = \\
 &= \sqrt{\frac{\pi}{k}} \frac{1}{(\delta + \sqrt{\delta^2 - 1})^{k+1}} \int_{\delta}^{\infty} \frac{1}{(1 + \mu_1 \sqrt{\mu_1^2 - 1} - \mu_1^2)} e^{-\varrho \mu_1} \mu_1^m d\mu_1 \leq \\
 &\leq \sqrt{\frac{\pi}{k}} \left[\left(\frac{2}{\varrho} \right)^m + \frac{m!}{\varrho^{m+1}} \right] \frac{1}{(\delta + \sqrt{\delta^2 - 1})^{k+1}}
 \end{aligned}$$

and similarly to the former

$$\begin{aligned}
 \left| \int_1^{\infty} e^{-\varrho \mu_2} \mu_2^n P_k(\mu_2) d\mu_2 \right| &\leq \int_1^{\infty} e^{-\varrho \mu_2} \mu_2^n \frac{2}{\sqrt{k\pi}} \cdot \frac{(\mu_2 + \sqrt{\mu_2^2 - 1})^k}{2(1 + \mu_2 \sqrt{\mu_2^2 - 1} - \mu_2^2)} d\mu_2 \\
 &\leq \frac{1}{\sqrt{\pi k}} \int_1^{\infty} e^{-\varrho \mu_2} \mu_2^n \frac{(2\mu_2)^k}{(1 + \mu_2 \sqrt{\mu_2^2 - 1} - \mu_2^2)} d\mu_2 \leq \frac{1}{\sqrt{\pi k}} \left[\left(\frac{2}{\varrho} \right)^n 4^k + \frac{(k+n)! 2^n}{\varrho^{k+n+1}} \right] \\
 H_k(n, m, \varrho) &< \frac{2}{k} \left[\left(\frac{2}{\varrho} \right)^m + \frac{m!}{\varrho^{m+1}} \right] \left[\left(\frac{2}{\varrho} \right)^n 4^k + \frac{2^k}{\varrho^{k+n+1}} (k+n)! \right] < \\
 &< \frac{2}{k} \left[\left(\frac{2}{\varrho} \right)^m + \frac{m!}{\varrho^{m+1}} \right] \left[\left(\frac{2}{\varrho} \right)^n 2^k + \frac{2^k}{\varrho^{k+n+1}} \right] (k+n)!.
 \end{aligned}$$

Therefore

$$(2k+1) H_k(n, m, \varrho) G_k(m, \varrho) K_k(n, \varrho) < C_k \frac{(k+n)!}{(k-n)!(k-m)!},$$

here

$$C_k = 2^4 \cdot q^{2k-n-m} \left[\left(\frac{2}{q} \right)^m + \frac{m!}{q^{m+1}} \right] \left[\left(\frac{2}{q} \right)^n 2^k + \frac{2^k}{q^{k+n+1}} \right],$$

whereby the convergence of the infinite series (24) and (25) is established.

In the course of the numerical calculations 5 terms of the infinite series integral J_I were taken into account.

LITERATURE

1. J. H. BARTLETT, Phys. Rev., **37**, 507, 1931.
2. A. H. BEUTLER, H. O. JÜNGER, Zs. f. Phys., **101**, 304, 1936.
3. See e. g. BUDÓ Á., Mechanika, p. 143, Tankönyvkiadó, Budapest, 1953.
4. W. GORDY, W. V. SMITH, R. F. TRAMBULO, Microwave Spectroscopy, John Wiley and Sons, New York, Chapman and Hall, London, 1953.
5. H. HELLMANN, Einführung in die Quantenchemie, pp. 84, 124—134, Franz Deuticke, Leipzig-Wien, 1937.
6. G. HERZBERG, Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules, pp. 60, 298—300, 308—314, P. Van Nostrand Company, Toronto—New York—London, 1950.
7. H. M. JAMES, A. S. COOLIDGE, J. Chem. Phys., **1**, 825, 1933.
8. J. M. B. KELLOGG, L. I. RAB, N. F. RAMSEY JR., J. R. ZACHARIAS, Phys. Rev., **57**, 677, 1940.
9. J. LENSE, Kugelfunktionen, pp. 25, 59, 61, 68, Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1950.
10. N. F. MOTT, H. N. SNEDDON, Wave Mechanics and its Applications, pp. 336—337, Clarendon Press, Oxford, 1948.
11. a. D. IVANENKO, A. SZOKOLOV, Klasszikus térelmélet, pp. 124—127, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1955.
12. b. G. BREIT, Phys. Rev., **34**, 553, 1929; **36**, 383, 1930; **39**, 616, 1932.
13. c. F. NEUMANN, Theorie des Potentials, Teubner, Leipzig, 1887.
14. d. See e. g. NOVÓBÁTKY K., NEUGEBAUER T., Elektrodinamika és optika, pp. 87—88, 161—164, Tankönyvkiadó, Budapest, 1952.
15. e. N. F. RAMSEY JR., Phys. Rev., **58**, 226, 1940.
16. f. N. ROSEN, Phys. Rev., **38**, 2099, 1931.
17. g. A. M. SESSLER, H. M. FOLEY, Phys. Rev., **92**, 1321, 1953.
18. h. a. J. SUCHER, H. M. FOLEY, Phys. Rev., **95**, 966, 1954.
19. i. H. A. S. ERIKSSON, Zs. f. Phys., **109**, 762, 1938.
20. j. Y. SUGIURA, Zs. f. Phys., **45**, 488, 1927.
21. k. S. C. WANG, Phys. Rev., **31**, 579, 1928.
22. l. C. ZEHNER, V. GUILLEMIN JR., Phys. Rev., **34**, 999, 1929.

МАГНИТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДВУХ ДВИЖУЩИХСЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Л. ЛАДИК и А. ЧУКАШ

Резюме

Дается приближенный метод для определения энергии магнитного взаимодействия двух движущихся электронов методом волновой механики. Метод применен в случае молекулы водорода, используя приближенные собственные функции Ванга. Оставляя параметры Ванга неизменными для энергии получается $24 \cdot 10^{-4}$ эв.

Это значение по порядку величины совпадает со значением вычисленным из энергии магнитного взаимодействия между спинами ядер, известной из спектра H_2 и составляет примерно 60% от энергии магнитного взаимодействия между спинами электронов, вычисленной для атома гелия. Однако это значение на порядок величины выше, чем значение, полученное для энергии магнитного взаимодействия двух движущихся электронов, с тем более точного выражения энергии запаздывающего взаимодействия в атоме гелия. В расчетах потребовалось определение таких интегралов с двумя центрами, которые в литературе не описаны. Их вычисление дано в приложении.

THE USE OF PERTURBATION METHODS FOR QUANTUM-CHEMICAL INVESTIGATIONS OF SYSTEMS BUILT UP FROM IDENTICAL UNITS

By

R. PAUNCZ

INSTITUTE FOR THEORETICAL PHYSICS, UNIVERSITY OF SZEGED, SZEGED

(Presented by P. Gombás. — Received 19. III. 1956)

The paper deals with the investigation of molecules built up from n identical units using perturbation considerations. By means of considerations based on a simple variant of the molecular orbital method we succeeded both in the case of energy values and in that of bond orders separating the results into sums of products in which the one factor contains quantities referring only to the basic unit, and the second depends on the data of the series. The second part of the paper deals with the calculations relating to the polyrylene series in order to illustrate the usefulness of the general method. According to the results of the calculations the method can be successfully applied and by its means it becomes possible to investigate the dependence of the quantities characterizing the series on the strength of the bonds connecting the single units.

Introduction

In theoretical chemical investigations cases frequently occur, in which the members of a series of compounds can be obtained by aid of successive condensation of a given unit. Such problems are met with in the theoretical examination of polymers, further some series of condensed aromatic compounds also belong here; thus for instance the members of the polyrylene series can be obtained by successive condensation of naphthalene, likewise that of anthracene yields the members of the polyanthene series, etc. For the theoretical investigation of these kinds of problems a simple variant of the molecular-orbital theory (linear combination of atomic orbitals) appears above all suitable. For the present, on account of the complicated molecular structure, there is namely not much hope for the application of the refinements of the method to the higher members of the series, on the other hand according to experiences made so far the main regularities are reproduced quite well also with the above-mentioned version of the molecular-orbital method. Unfortunately, owing to the high order of the determinantal equation occurring, the application of even this simple method becomes very tedious when the higher members of the series are investigated. Therefore it is desirable to work out a treatment in which the calculations relating to the individual members of the series are reduced to those referring to the basic unit. For this purpose the use of the perturbation method seems most appropriate.

The above-mentioned problems were first successfully investigated by DUNLISON AND RUSHBROKE [1]. Their treatment refers to the case in which

there is a connection between the repeating units only in one place. This results in an equation suitable for the determination of the energy values. In the following the same problem is dealt with using the perturbation method.

The case investigated by us is more general in so far as it also extends to multiple linking of the units, furthermore formulae are developed for the determination of the energy values as well as for the coefficients. On the basis of the latter the computation of the bond order and bond length, resp. becomes feasible.

The paper is divided into two parts. In the first the general method is elaborated. The results obtained here are very general and suitable for wide-range application as no special assumption is made regarding the individual units. Hence they are valid even in those cases when not only π -electrons play an important role within the unit (the problems of polymers). In the second part of the paper the treatment of the polyethylene series is presented. This serves on the one hand as an illustration for the use of the method, and on the other allows the investigation of some interesting properties of the series.

I

The perturbation method for the treatment of systems built up from identical units

1. Basic assumptions and notation

The one-electron function extending over the whole molecule (molecular orbital) is assumed to be the linear combination of functions centered on the individual atoms (atomic orbitals)

$$\psi_i = c_{1i} u_1 + c_{2i} u_2 + \dots + c_{ni} u_n,$$

where ψ_i is the i -th molecular orbital and u_k represents the electron function belonging to atom k . The determination of the coefficients is carried out with the variation method by minimizing the energies of the individual orbitals according to the following secular equations:

$$\sum_k (H_{ik} - \varepsilon S_{ik}) c_{ik} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

where

$$H_{ik} = \int u_i^* H u_k d\tau, \quad S_{ik} = \int u_i^* u_k d\tau.$$

H represents the Hamiltonian derived on the basis of the effective potential acting upon the single electrons and ε the energy of the individual molecular orbital.

in each orbital two electrons with opposite spins can be accommodated, the filling up of the orbitals takes place in order of increasing energy.

Regarding the matrix elements the following simplifications are used:

a) $S_{rr} = 1$, $S_{sr} = 0$ (the overlap integral is taken to be 0).

b) H_{ik} differs from zero only in the case when $i = k$, or when i and k are indices belonging to neighbouring atoms.

These simplifications allow an alternative discussion of the problem:

Let us consider the coefficients of the i -th molecular orbital (c_{1i} , c_{2i} , ..., c_{ni}) to be the components of an n -dimensional vector and denote the corresponding vector with r_i . In view of the above-mentioned simplifications the secular equations (2) are equivalent to the matrix eigenvalue problem as follows:

$$Hr_i = \varepsilon_i r_i. \quad (3)$$

This method of treatment proves to be very useful in the investigation of systems built up from identical units when using perturbation calculation.

2. The perturbation calculation

Consider a series, the members of which can be obtained by the repetition of a given unit. The connection between the single units be as follows:

a) The i -th unit should be joined only to the preceding and the subsequent unit. (As an exception serve the first and the last units which are joined to the second and the last but one, resp.)

b) The connection between the units following each other be of the same structure.

More detailed, the latter means the following. Let us number the atoms of the first unit from 1 to e . In the following units the same numbering is used, the upper index indicating only the unit involved. Connection of identical structure means that the joining between the units following each other is as follows:

$$\begin{array}{c} f-1 \qquad \qquad \qquad f \qquad \qquad \qquad f+1 \\ \begin{array}{c} \text{---} \left(\begin{array}{cc} s & r \\ s' & r' \\ s'' & r'' \end{array} \right) \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \left(\begin{array}{cc} s & r \\ s' & r' \\ s'' & r'' \end{array} \right) \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \left(\begin{array}{cc} s & r \\ s' & r' \\ s'' & r'' \end{array} \right) \text{---} \end{array} \end{array} \quad (4)$$

The matrix of the n -th member of the series occurring in equation (3) has according to the above the following form:

$$H = \begin{vmatrix} A & B & . & . & . & . \\ \tilde{B} & A & B & . & . & . \\ . & \tilde{B} & A & B & . & . \\ . & . & \tilde{B} & A & B & . \\ . & . & . & \tilde{B} & A & B \\ . & . & . & . & \tilde{B} & A \end{vmatrix},$$

where, A, \tilde{B}, B mean matrices of order e . A represents a matrix of a single unit B corresponds to the connection between units f and $f + 1$, its non-vanishing elements are: $H_{rs}, H_{r's'}, H_{s''s''} \dots$ etc. \tilde{B} corresponds to the connection between the units f and $f - 1$. This is the transpose of B , its non-vanishing elements $H_{sr}, H_{s'r'}, H_{s''r''}$ etc. The eigenvectors a_i, \dots, a_e of the matrix A are vectors of dimension e , their components being $a_i = \{c_{1i}, c_{2i}, \dots, c_{ei}\}$ and the corresponding eigenvalues ε_i . In the following only those cases will be investigated in detail in which the basic unit has no degenerate eigenvalue. The calculations can be easily generalized for the case when some eigenvalues are degenerate.

For matrix of the unperturbed problem that matrix should be chosen where B and \tilde{B} , resp. are zero matrices. From the physical point of view this means that no connection between the individual units is assumed. The eigenvalues and eigenvectors of this matrix can be given at once: its eigenvalues are identical with those of the basic unit with the difference that each eigenvalue ε_i is n -fold degenerate, n linearly independent eigenvectors belong to it. Choosing the latter we have a high degree of arbitrariness, as, if n linearly independent vectors belong to the i -th eigenvalue, any linear combination of them is an eigenvector as well and belongs to the same eigenvalue. It is appropriate to choose the n linearly independent eigenvectors as follows:

$$r_{i1}^0 = \begin{pmatrix} a_i \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r_{i2}^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ a_i \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots \quad r_{in}^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ a_i \end{pmatrix},$$

$r_{i1}^0, r_{i2}^0, \dots, r_{in}^0$ are vectors of dimension $n \cdot e$. Each "component" occurring in formula (6) represents a vector of dimension e (the corresponding eigenvector of A).

Let us consider the difference between the original matrix and that corresponding to the unperturbed problem to be a perturbation matrix.

$$P = \begin{vmatrix} . & B & . & . & . & . \\ \tilde{B} & . & B & . & . & . \\ . & \tilde{B} & . & B & . & . \\ . & . & \tilde{B} & . & B & . \\ . & . & . & \tilde{B} & . & B \\ . & . & . & . & \tilde{B} & . \end{vmatrix}, \quad (7)$$

In order that this really represents a perturbation it is necessary that the connection between the single units should be looser than those within the single units. Thus the non-vanishing matrix elements of B and \tilde{B} are smaller regarding their numerical values than the elements of matrix A .

On the basis of (6) and (7) the following relation is easily verified:

$$(r_{jh}^0 Pr_{ik}^0) = \begin{cases} (a_j B a_i), & \text{if } h = k - 1, \\ (a_j \tilde{B} a_i), & \text{if } h = k + 1, \\ 0, & \text{if } \begin{cases} h \neq k - 1, \\ h \neq k + 1. \end{cases} \end{cases} \quad (8)$$

here

$$\begin{aligned} (a_i B a_i) &= (a_i \tilde{B} a_i) = \sum c_{ri} H_{rs} c_{si} \equiv \gamma_i, \\ (a_i B a_j) &= (a_j \tilde{B} a_i) = \sum c_{ri} H_{rs} c_{sj} \equiv \vartheta_1^{ij} \equiv \vartheta_2^{ji}, \\ (a_j B a_i) &= (a_i \tilde{B} a_j) = \sum c_{si} H_{sr} c_{rj} \equiv \vartheta_1^{ji} \equiv \vartheta_2^{ij}. \end{aligned} \quad (9)$$

3. The examination of the perturbed eigenvalues

In the first step the exact zero-order coefficients are determined together with the first-order energy correction which is evaluated on the basis of the usual secular equations

$$p_{is}^0 = \sum_{l=1}^n a_{sl}^i r_{il}^0, \quad \sum a_{sl}^i [(r_{is}^0 Pr_{il}^0) - \varepsilon_i' \delta_{sl}] = 0. \quad (10)$$

Using (8) and (9) it follows that $(r_{is}^0 Pr_{il}^0)$ is zero, except when $s = l + 1$ and $s = l - 1$, resp., in which case its value is γ_i . The secular determinant is the following

$$\begin{vmatrix} -\varepsilon'_i & \gamma_i & . & . & . & . \\ \gamma_i & -\varepsilon'_i & \gamma_i & . & . & . \\ . & \gamma_i & -\varepsilon'_i & \gamma_i & . & . \\ . & . & \gamma_i & -\varepsilon'_i & \gamma_i & . \\ . & . & . & \gamma_i & -\varepsilon'_i & \gamma_i \\ . & . & . & . & \gamma_i & -\varepsilon'_i \end{vmatrix} = 0. \quad (1)$$

The secular determinant (11) and the corresponding secular equations are well known (they occur for instance in the problem of the linear chain polyenes). The zeros of the determinant and the coefficients of the system of equations can be given at once:

$$\varepsilon'_{ik} = 2 \gamma_i \cos ka, \quad (12)$$

$$a'_{sl} = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin sl a, \quad a = \frac{\pi}{n+1}. \quad (13)$$

In the first-order approximation the level corresponding to the i -th eigenvalue is split into n levels, the magnitude of the splitting is $2\gamma_i$ (i. e. the distance between the highest and lowest levels originating from the i -th level). It is worth mentioning that a'_{sl} does not depend on i , accordingly the upper index is omitted in the following.

The second-order energy correction is as follows:

$$\varepsilon''_{ik} = \sum_{j \neq i} \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \sum_{l=1}^n (p_{ik}^0 P p_{jl}^0)^2.$$

Using (10) and (13), further taking (8) and (9) into account

$$\begin{aligned} (p_{ik}^0 P p_{jl}^0) &= \sum_{u=1}^n \sum_{v=1}^n a_{ku} a_{lv} (r_{iu}^0 P r_{jv}^0) = \vartheta_1^{ij} \sum_{v=2}^n a_{k v-1} a_{lv} + \\ &+ \vartheta_2^{ij} \sum_{v=1}^{n-1} a_{k v+1} a_{lv} = \vartheta_1^{ij} \sum_{v=1}^n a_{k v-1} a_{lv} + \vartheta_2^{ij} \sum_{v=1}^n a_{k v+1} a_{lv} \end{aligned} \quad (14)$$

is obtained.

(In the last transformation the fact is used that $a_{k0} = a_{k n+1} = 0$). Consequently

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^n (p_{ik}^0 P p_{jl}^0)^2 &= \sum_{l=1}^n \sum_{v=1}^n \sum_{w=1}^n \{ (\vartheta_1^{ij})^2 a_{k v-1} a_{k w-1} + (\vartheta_2^{ij})^2 a_{k v+1} a_{k w+1} + \\ &+ \vartheta_1^{ij} \vartheta_2^{ij} (a_{k v-1} a_{k w+1} + a_{k v+1} a_{k w-1}) \} a_{lv} a_{lw}. \end{aligned}$$

Summing over l with given v and w and taking into account that $\sum_{l=1}^n a_{lv} a_{lw} = \delta_{vw}$ the following is obtained :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (p_{ik}^0 P p_{jl}^0)^2 &= (\partial_1^{ij})^2 \sum_{v=1}^n a_{kv-1}^2 + (\partial_2^{ij})^2 \sum_{v=1}^n a_{kv+1}^2 + 2 \partial_1^{ij} \partial_2^{ij} \sum_{v=1}^n a_{kv-1} a_{kv+1} = \\ &= (1 - a_{kn}^2) (\partial_1^{ij})^2 + (1 - a_{k1}^2) (\partial_2^{ij})^2 + 2 \partial_1^{ij} \partial_2^{ij} (1 - n a_{k1}^2). \end{aligned}$$

Let us introduce the following notation:

$$\zeta_{\kappa\lambda}^i = \sum_{j \neq i}^e \frac{\partial_{\kappa}^{ij} \partial_{\lambda}^{ij}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}, \quad \kappa, \lambda = \begin{cases} 1, \\ 2. \end{cases} \quad (15)$$

In view of the fact that $a_{k1}^2 = a_{kn}^2$ (namely $a_{kf} = -(-1)^k a_{kn+1-f}$), the second-order energy correction is as follows :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ik}'' &= (1 - a_{k1}^2) (\zeta_{11}^i + \zeta_{22}^i) + 2 (1 - n a_{k1}^2) \zeta_{12}^i = \\ &= \left(1 - \frac{2}{n+1} \sin^2 k \frac{\pi}{n+1} \right) (\zeta_{11}^i + \zeta_{22}^i) + 2 \left(1 - \frac{2n}{n+1} \sin^2 k \frac{\pi}{n+1} \right) \zeta_{12}^i. \end{aligned} \quad (16)$$

In the above results it is essential that both in the first-order and in the second-order eigenvalue correction we succeeded in separating them into factors, in the first of which only quantities referring to the basic unit occur ($\gamma_i, \zeta_{K\lambda}^i$), whereas in the second only data characterizing the series.

4. Examination of the perturbed eigenvectors

For the investigation of the bond order and the bond length, resp. the perturbed eigenvectors are needed. For the examination of the bonds connecting the single units it is sufficient to investigate the first-order perturbation, however, for the calculation of the bond orders corresponding to bonds within the units also the second-order perturbation calculation is needed. The perturbed eigenvectors in the second-order approximation are as follows :

$$r_{ik}'' = p_{ik}^0 + p_{ik}^1 + p_{ik}^2, \quad (17)$$

where

$$p_{ik}^1 = \sum_{m \neq k}^n (im/ik; 1) p_{im}^0 + \sum_{j \neq i}^e \sum_{m=1}^n (jm/ik; 1) p_{jm}^0, \quad (18)$$

$$p_{ik}^2 = (ik/ik; 2) p_{ik}^0 + \sum_{m \neq k}^n (im/ik; 2) p_{im}^0 + \sum_{j \neq i}^e \sum_{m=1}^n (jm/ik; 2) p_{jm}^0. \quad (19)$$

The coefficients occurring in formulae (18) and (19) are according to CORSON [1] the following.

$$(im/ik; 1) = \sum_{j \neq i}^e \sum_{l=1}^n \frac{(p_{im}^0 P p_{jl}^0) (p_{jl}^0 P p_{ik}^0)}{(\varepsilon_i - \varepsilon_j) (\varepsilon'_{ik} - \varepsilon'_{im})}; \quad (2)$$

$$(jm/ik; 1) = \frac{(p_{jm}^0 P p_{ik}^0)}{\varepsilon_i - \varepsilon_j}; \quad (2)$$

$$(ik/ik; 2) = -\frac{1}{2} \sum_{\mu \neq i}^e \sum_{v=1}^n (uv/ik; 1)^2; \quad (2)$$

$$(im/ik; 2) = \sum_{j \neq i}^e \sum_{v=1}^n \frac{(p_{im}^0 P p_{jv}^0) (jv/ik; 2)}{\varepsilon'_{ik} - \varepsilon'_{im}} - \frac{\varepsilon''_{ik} (im/ik; 1)}{\varepsilon'_{ik} - \varepsilon'_{im}}; \quad (2)$$

$$(jm/ik; 2) = - \sum_{u \neq i}^e \sum_{v=1}^n \frac{(p_{jm}^0 P p_{uv}^0) (uv/ik; 1)}{\varepsilon_j - \varepsilon_i} - \frac{\varepsilon'_{ik} (p_{jm}^0 P p_{ik}^0)}{(\varepsilon_j - \varepsilon_i)^2}. \quad (2)$$

Of the vector equations (17)–(19), which correspond to vectors of dimension n , *e.* let us consider those parts which correspond to the f -th components, they will be vector equations of dimension e .

In other words that vector will be investigated the components of which are the coefficients belonging to the atoms of the f -th unit,

$$(r''_{ik})_f = a_{kf} \alpha_i + (p^1_{ik})_f + (p^2_{ik})_f, \quad (2)$$

where

$$(p^1_{ik})_f = \left(\sum_{m \neq k}^n (im/ik; 1) a_{mf} \right) \alpha_i + \sum_{j \neq i}^e \left(\sum_{m=1}^n (jm/ik; 1) a_{mf} \right) \alpha_j, \quad (2)$$

$$(p^2_{ik})_f = \left[(ik/ik; 2) a_{kf} + \sum_{m \neq k}^n (im/ik; 2) a_{mf} \right] \alpha_i + \sum_{j \neq i}^e \left(\sum_{m=1}^n (jm/ik; 2) a_{mf} \right) \alpha_j. \quad (2)$$

In the evaluation of the sums occurring in formulae (26) and (27) the procedure given in detail in the preceding paragraph for the evaluation of the second-order correction of the eigenvalues is followed. The matrix elements $(p_{im}^0 P p_{jl}^0)$ are given on the basis of equation (14). In the following steps, we succeeded using formulae (20)–(24), in separating the summing of each term into two parts, the first containing only the quantities relating to the basic units, the second those related to the a_{ik} -s

$$a_{ik} = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin ik \frac{\pi}{n+1}.$$

In the sums referring to the basic unit the following notations are used :

$$\alpha_{\kappa}^{ij} = \frac{\vartheta_{\kappa}^{ij}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \quad (28)$$

$$\varrho_{\kappa\lambda}^i = \sum_{j \neq i}^e \alpha_{\kappa}^{ij} \alpha_{\lambda}^{ij} , \quad (29)$$

$$\pi_{\kappa\lambda}^{ij} = \sum_{u \neq i}^e \alpha_{\kappa}^{iu} \vartheta_{\lambda}^{uj} , \quad (30)$$

$$\tau_{\kappa\lambda\mu}^i = \sum_{j \neq i}^e \alpha_{\kappa}^{ij} \pi_{\lambda\mu}^{ij} \equiv \sum_{j \neq i}^e \sum_{u \neq i}^e \frac{\vartheta_{\kappa}^{ij} \vartheta_{\lambda}^{iu} \vartheta_{\mu}^{uj}}{(\varepsilon_i - \varepsilon_j)(\varepsilon_i - \varepsilon_u)} . \quad (31)$$

Using the definition of ϑ_{κ}^{ij} -s the following identities are easily verified :

$$\begin{aligned} \tau_{121}^i = \tau_{212}^i &\equiv \kappa_i , & \tau_{122}^i = \tau_{211}^i &\equiv \lambda_i , & \tau_{221}^i = \tau_{222}^i &\equiv \mu_i , \\ \tau_{112}^i &= \tau_{111}^i \equiv \nu_i . \end{aligned} \quad (32)$$

The sums relating to the a_{ik} -s can be divided into two groups : the sums occurring in the first group can be evaluated simply by utilizing the orthogonality properties of the a_{ik} -s

$$\left(\sum_{t=1}^n a_{lt} a_{kt} = \delta_{lk} \right) .$$

The sums occurring in the further steps are as follows :

$$\begin{aligned} \sum_{t=1}^n a_{m, t-1} a_{k, t-1} &= \delta_{mk} - a_{mn} a_{kn} ; & \sum_{t=1}^n a_{m, t+1} a_{k, t+1} &= \delta_{mk} - a_{m1} a_{k1} , \\ \sum_{t=1}^n (a_{m, t-1} a_{k, t+1} + a_{m, t+1} a_{k, t-1}) &= 2 \cos 2k\alpha \cdot \delta_{mk} + a_{k1} a_{m1} + a_{mn} a_{kn} , \\ \sum_{t=1}^n (a_{m, t-1} a_{k, t+2} + a_{m, t+1} a_{k, t-2}) &= 2 \cos 3k\alpha \delta_{mk} + a_{k2} a_{m1} + a_{k, n-1} a_{mn} . \end{aligned}$$

The other group consists of the following type of sums :

$$\sum_i \lambda_i^{\mu f} = \sum_{m \neq k}^n \frac{\alpha_{k\lambda} a_{m\mu} a_{mf}}{(\cos k\alpha - \cos m\alpha)^i} . \quad (34)$$

The computation of the latter is given in detail in the Appendix.

All other sums occurring in the computation can be reduced to the above-mentioned ones utilizing the orthogonality properties of the a_{ik} -s and other simple trigonometrical relations.

Concerning the sums occurring in the perturbation calculation of the eigenvectors the following results are obtained by means of the method outlined above :

$$\sum_{m \neq k}^n (im/ik; 1), \quad a_{nf} = \frac{1}{2\gamma_i} \left\{ -\zeta_{11}^i \sum_1^{nnf} - \zeta_{22}^i \sum_1^{11f} + \zeta_{12}^i \left(\sum_1^{11f} + \sum_1^{nnf} \right) \right\} . \quad (35)$$

For the computation the following relation was used :

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^n (p_{lm}^0 P p_{jl}^0) (p_{jl}^0 P p_{ik}^0) &= \sum_{l=1}^n \left\{ \partial_1^{ij} \sum_{t=1}^n a_{m,t-1} a_{lt} + \partial_2^{ij} \sum_{t=1}^n a_{m,t+1} a_{lt} \right\} . \\ &\left\{ \partial_1^{ji} \sum_{s=1}^n a_{ls} a_{k,s+1} + \partial_2^{ji} \sum_{s=1}^n a_{ls} a_{k,s-1} \right\} = \\ &= (\partial_1^{ij})^2 \sum_{t=1}^n a_{m,t-1} a_{kt-1} + (\partial_2^{ij})^2 \sum_{t=1}^n a_{m,t+1} a_{kt+1} + \partial_1^{ij} \partial_2^{ij} \sum_{t=1}^n (a_{m,t-1} a_{kt-1} + a_{m,t+1} a_{kt+1}) \end{aligned}$$

$$b) \quad (jm/ik; 1) = a_2^{ij} \sum_{t=1}^n a_{mt} a_{kt+1} + a_1^{ij} \sum_{t=1}^n a_{mt} a_{kt-1} , \quad (1)$$

$$\sum_{j \neq i}^e \left(\sum_{m=1}^n (jm/ik; 1) a_{mf} \right) a_j = a_{kf+1} \check{b}_i + a_{kf-1} \check{c}_i , \quad (2)$$

where

$$\check{b}_i = \sum_{j \neq i}^e a_2^{ij} a_j , \quad \check{c}_i = \sum_{j \neq i}^e a_1^{ij} a_j . \quad (3)$$

where

$$c) \quad (ik/ik; 2) a_{kf} = -\frac{1}{2} \left\{ (1 - a_{k1}^2) (\varrho_{11}^i + \varrho_{22}^i) + 2(1 - n a_{k1}^2) \varrho_{12}^i \right\} a_{kf} . \quad (4)$$

The deduction of this part is essentially identical with the procedure outlined for the second order perturbation calculation of the eigenvalue.

$$\begin{aligned} d) \quad (jm/ik; 2) &= \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \left\{ \delta_{mk} (\pi_{12}^{ij} + \pi_{21}^{ij} - \gamma_i [a_1^{ij} + a_2^{ij}]) + \right. \\ &+ a_{m1} a_{k1} (\pi_{11}^{ij} - \pi_{21}^{ij}) + a_{mn} a_{kn} (\pi_{22}^{ij} - \pi_{12}^{ij}) + \\ &+ \sum_s a_{ms} a_{k,s-2} (\pi_{11}^{ij} - \gamma_i a_1^{ij}) + \sum_s a_{ms} a_{k,s+2} (\pi_{22}^{ij} - \gamma_i a_2^{ij}) \left. \right\} . \end{aligned} \quad (5)$$

With the method outlined in a) the first member of (24) is as follows :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \left\{ \pi_{12}^{ij} \sum_s a_{m,s-1} a_{k,s-1} + \pi_{21}^{ij} \sum_s a_{m,s+1} a_{k,s+1} + \right. \\ \left. + \pi_{11}^{ij} \sum_s a_{m,s+1} a_{k,s-1} + \pi_{22}^{ij} \sum_s a_{m,s-1} a_{k,s+1} \right\} . \end{aligned}$$

The second member :

$$- \frac{2 \gamma_i \cos ka}{(\varepsilon_i - \varepsilon_j)^2} \left\{ \partial_1^{ij} \sum_t a_{mt} a_{kt-1} + \partial_2^{ij} \sum_t a_{mt} a_{kt+1} \right\} .$$

Using the following relation :

$$2 \cos ka \cdot a_{kf} = a_{kf+1} + a_{kf-1}$$

and (33) the above result is obtained

$$\sum_{j \neq i}^e \left(\sum_{m=1}^n (jm/ik; 2) a_{mj} \right) a_j = a_{kf} \check{\theta}_i + a_{kf-2} \check{n}_i + a_{kf+2} \check{f}_i, \quad (41)$$

where:

$$\check{\theta}_i = \sum_{j \neq i}^e \frac{\varphi^{ij}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} a_j, \quad \check{n}_i = \sum_{j \neq i}^e \frac{\psi^{ij}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} a_j, \quad \check{f}_i = \sum_{j \neq i}^e \frac{\chi^{ij}}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} a_j. \quad (42)$$

$$\varphi^{ij} = \begin{cases} \pi_{12}^{ij} + \pi_{21}^{ij} - \gamma_i (a_1^{ij} + a_2^{ij}), & \text{if } f \neq 1, f \neq n. \\ \pi_{12}^{ij} - \gamma_i a_2^{ij}, & \text{if } f = 1, \\ \pi_{21}^{ij} - \gamma_i a_1^{ij}, & \text{if } f = n. \end{cases} \quad (43)$$

ψ^{ij}, χ^{ij} can be given in an analogous manner, however, their explicit form is not needed in the following.

$$\begin{aligned} \sum_{m \neq k}^n (im/ik; 2) a_{mf} &= \frac{1}{2\gamma_i} \left\{ (\lambda_i - \mu_i) \sum_1^{12f} + (\lambda_i - \nu_i) \sum_1^{nn-1f} + \right. \\ &+ (\gamma_i \varrho_{11}^i - \nu_i) \sum_1^{n-1nf} + (\gamma_i \varrho_{22}^i - \mu_i) \sum_1^{21f} + (\lambda_i - \gamma_i \varrho_{12}^i) (\sum_1^{21f} + \sum_1^{n-1nf}) \left. \right\} - \\ &- \frac{1}{(2\gamma_i)^2} \left\{ (1 - a_{k1}^2) (\zeta_{11}^i + \zeta_{22}^i) + 2(1 - na_{k1}^2) \zeta_{12}^i \right\} \cdot \\ &\left\{ -\zeta_{11}^i \sum_2^{nnf} - \zeta_{22}^i \sum_2^{11f} + \zeta_{12}^i (\sum_2^{11f} + \sum_2^{nnf}) \right\}. \end{aligned} \quad (44)$$

On deducing formula e) the chief steps are the following: For the calculation of the first member of (23) formula (40) is used and in a manner analogous to that described above the following is obtained:

$$\begin{aligned} \sum_j \sum_v (p_{im}^0 P p_{jv}^0) (jv/ik; 2) &= [\nu_i + \kappa_i - \gamma_i (\varrho_{11}^i + \varrho_{21}^i)] \sum_t a_{mt-1} a_{kt} + \\ &+ [\mu_i + \kappa_i - \gamma_i (\varrho_{12}^i + \varrho_{22}^i)] \sum_t a_{nt+1} a_{kt} + (\lambda_i - \mu_i) a_{k1} a_{m2} + (\lambda_i - \nu_i) a_{kn} a_{mn-1} + \\ &+ (\nu_i - \gamma_i \varrho_{11}^i) (\sum_t a_{mt} a_{kt-1} - a_{mn} a_{kn-1}) + (\mu_i - \gamma_i \varrho_{22}^i) (\sum_t a_{mt} a_{kt+1} - a_{m1} a_{k2}) + \\ &+ (\lambda_i - \gamma_i \varrho_{12}^i) \sum_t (a_{mt+1} a_{kt-2} + a_{mt-1} a_{kt+2}) = \\ &= (\kappa_i - \gamma_i \varrho_{12}^i) \sum \frac{(a_{mt-1} + a_{mt+1})}{2 a_{mt} \cos m \alpha} a_{kt} + (\nu_i + \mu_i - \gamma_i [\varrho_{11}^i + \varrho_{22}^i]) \sum_{t=1}^n \frac{(a_{kt+1} + a_{kt-1})}{2 a_{kt} \cos k \alpha} a_{mt} + \\ &+ (\lambda_i - \mu_i) a_{k1} a_{m2} + (\lambda_i - \nu_i) a_{kn} a_{mn-1} - \\ &- (\nu_i - \gamma_i \varrho_{11}^i) a_{mn} a_{kn-1} - (\mu_i - \gamma_i \varrho_{22}^i) a_{m1} a_{k2} + \\ &+ (\lambda_i - \gamma_i \varrho_{12}^i) (a_{m1} a_{k2} + a_{mn} a_{kn-1}) \end{aligned}$$

In the case of $m \neq k$ the values of the first two sums are zero. Summing, the first part of e) is obtained. For the computation of the second part of the formula the same line must be followed as in the evaluation of a) and c) resp.

Using the formulae $a) - e)$ and the values of $\sum_i \lambda_i^k f$ the perturbed eigenvectors take up the following forms:

$$\begin{aligned} (p_{ik}^0)_f &= a_{kf} a_i, \\ (p_{ik}^1)_f &= a_{kf+1} (D_i a_i + \check{b}_i) - a_{kf-1} (E_i a_i - \check{c}_i), \\ (p_{ik}^2)_f &= a_{kf} (F_i a_i + \check{g}_i) + \frac{a_{kf}}{\sin^2 k\alpha} G_i a_i + \\ &+ a_{kf+2} (H_i a_i + \check{n}_i) + a_{kf-2} (I_i a_i + \check{f}_i). \end{aligned} \quad (4)$$

$D_i - \dots - I_i$ are independent of k , each can be separated into sums of products the first factor of which contains quantities referring only to the basic unit and the second to the data of the series (n, f) . The separations for the quantities needed in the further steps are given in the following.

$$\begin{aligned} D_i &= \frac{n-2f}{n+1} A_i - \bar{A}_i, & E_i &= D_i + \frac{2}{n+1} A_i. \\ F_i &= -\frac{1}{2} (q_{i1}^1 + q_{i2}^1) + \frac{A_i}{2\gamma_i^2 (n+1)} [e(B_i + C_i) + 2C_i] + \\ &+ \frac{\bar{A}_i}{2\gamma_i^2} (B_i + C_i) (n+1-2f), & f &\neq 1, \\ & & f &\neq n, \\ F_i^{(1)} &= F_i^{(n)} = F_i - \frac{1}{4} q_{i1}^1 + \frac{3}{4} q_{i2}^1, & f &= 1, \\ & & f &= n, \end{aligned} \quad (4)$$

where

$$\begin{aligned} A_i &= \zeta_{i2}^i - \frac{1}{2} (\zeta_{i1}^i + \zeta_{i2}^i), & \bar{A}_i &= \frac{1}{2} (\zeta_{i1}^i - \zeta_{i2}^i), \\ B_i &= \zeta_{i2}^i + \frac{1}{2} (\zeta_{i1}^i + \zeta_{i2}^i), & C_i &= \frac{1}{n+1} \left(n \zeta_{i2}^i - \frac{1}{2} [\zeta_{i1}^i + \zeta_{i2}^i] \right), \\ e &= \frac{1}{3} \{ 3(n+1-f)^2 - 2(n+1)^2 + 3f^2 - 1 \}. \end{aligned} \quad (4)$$

5. Calculation of bond order

Formulae (45) allow the investigation of the bond order by means of the perturbation method. The partial bond order belonging to the (ik) -th level and referring to two neighbouring atoms a and b , will be defined as follows

$$p_{ab}^{ik} = c_a^{ik} c_b^{ik}. \quad (48)$$

aking components a and b , of the vector equations (45) the coefficients belonging to atom a and b occurring in the f -th unit are obtained. The bond order obtained by summing the partial bond orders over the occupied levels and multiplying them with the number of electrons in the individual levels. In the following only the case in which the basic unit contains an even number of atoms will be investigated in detail. In it the summation over i runs from 1 to $n/2$ and over k from 1 to n . Summing over k the following two relations are used :

$$\sum_{K=1}^n a_{kl} a_{km} = \delta_{lm}, \quad \sum_{k=1}^n \frac{a_{kf}^2}{\sin^2 ka} = \frac{2}{n+1} f(n+1-f). \quad (49)$$

The bond order is computed including the second-order members.

a) Both atoms are in the same unit

Because of (45) the first-order correction vanishes and thus within the individual units only the second-order correction is added to the original bond order. Likewise the third-order correction vanishes too. All this shows that the bonds within the single units are affected only to a small extent.

b) The two atoms are in different, neighbouring units

In this case the value of the second-order correction is zero.

In the case of *a)* and *b)*, resp. the correction of the bond order is the following :

$$\begin{aligned} \Delta p_{ab} = 2 \sum_{i=1}^{e/2} \{ & (D_i^2 + E_i^2) c_a^i c_b^i + D_i (c_a^i \check{b}_b^i + c_b^i \check{b}_a^i) + E_i (c_a^i \check{c}_b^i + c_b^i \check{c}_a^i) + \\ & + \check{b}_a^i \check{b}_b^i + \check{c}_a^i \check{c}_b^i + (c_a^i \check{d}_b^i + c_b^i \check{d}_a^i) + \\ & + 2 c_a^i c_b^i [F_i + \frac{2}{n+1} f(n+1-f) G_i] \}. \end{aligned} \quad (50)$$

$$b) \quad \Delta p_{ab} = 2 \sum_{i=1}^{e/2} \{ (D_i - E_i) c_a^i c_b^i + c_a^i \check{b}_b^i + c_b^i \check{b}_a^i \}, \quad \begin{matrix} a \rightarrow f, \\ b \rightarrow f+1. \end{matrix} \quad (51)$$

With this result the purpose outlined in the introduction is achieved also in the case of the bond orders, as the use of formulae (50) and (51) allow the uniform treatment of the members of the series. After determining the quantities relating to the basic unit the bond order for any member of the series can be easily computed with the help of formulae (50), (51) and (46).

II

The investigation of the polyrylene series with the perturbation method

1. Justification of the use of the method

The members of the polyrylene series can be obtained by the successive condensation of naphthalene. A few members were investigated with the molecular orbital method with respect to their physical and chemical properties by PAUNCZ and WILHEIM [3]. According to their results the method renders the main features of the spectra qualitatively correctly, however, from the quantitative point of view strong deviations occur. As for the first transition a too small excitation energy is obtained and this result is essentially less good than was to be expected from the usual power of the molecular orbital method.

The second interesting conclusion is that the bond lengths corresponding to the bonds connecting the single units are the longest among all the bond lengths occurring in the molecule; this shows that the connection between the individual units is essentially weaker than the connection within the units. Thus, the condition for the applicability of the perturbation method given in paragraph I.2 is fulfilled and this allows a uniform examination of the series.

In the treatment of the condensed aromatic compounds using the molecular orbital method the following assumptions are made:

The most important physical and chemical properties of the molecules are determined by the so called π -electron distributions. Their number equals the number of the carbon atoms. The molecular orbital given in I.1 is a linear combination of these π -electron atomic orbitals. Regarding the H_{ik} matrix elements the following assumptions are used:

$$\text{a) } H_{ii} = \alpha; \quad \text{b) } H_{ik} = \beta;$$

i and k are indices of neighbouring atoms.

Let us divide each equation in the systems of equations (2) by β and introduce the following notation:

$$\frac{\alpha - \varepsilon}{\beta} = -x. \quad (5)$$

In the investigation of PAUNCZ and WILHEIM the value of all integrals $\int u_i^* H u_k$ corresponding to neighbouring atoms was assumed to be equal.

The perturbation method renders possible the investigation of the problem of how the eigenvalues and bond orders are affected if allowance is made for the fact that the values of the integrals $\int u_i^* H u_k d\tau$ are different in the molecule

as a consequence of the differences in the bond lengths. In the following it will only be taken into account that the bond lengths corresponding to the bonds connecting the individual units are greater than the length of the average bond within the individual units. Consequently, the value of β belonging to the former is smaller than that of the average β_{av} . In the further steps allowance should be made for the fact that even within the units the bond lengths are not the same and consequently the β -values are different. This problem will not be investigated in this paper.

It follows from the above that our aim is not the full exploration of the problem, but only the examination of the extent to which the method elaborated here contributes to the explanation of the physical and chemical behaviour of the series.

Let us denote the quotient of β and β_{av} by λ . Allowing for the dependence of β on the bond length, the value 0.8 will be used for λ .

2. Symmetry considerations

Each member of the series has the common property of being symmetrical with respect to the vertical axis of the molecule, the molecular orbitals are therefore either symmetrical or antisymmetrical with respect to that axis. This fact allows a simplification in the computations, as the value of ϑ_1^{ij} and ϑ_2^{ij} occurring in each quantity and referring to the basic unit is zero, if i and j refer to two states belonging to different symmetry species. Therefore, the summations can be carried out separately for the symmetrical and antisymmetrical levels. In the case of the eigenvalues this means that for a symmetrical eigenvalue the corrections are calculated only from the symmetrical ϑ_1^{ij} and ϑ_2^{ij} , respectively and the situation is analogous in the case of the antisymmetrical eigenvalues.

A further simplification arises from the fact that the basic unit (the naphthalene molecule) is symmetrical with respect to the horizontal axis. As the atoms occurring in the bonds connecting the single units are arranged symmetrically about the horizontal axis, their coefficients are either identical or have opposite sign. With an appropriate numbering of the levels

$$\vartheta_1^{ij} = (-1)^{i+j} \vartheta_2^{ij}.$$

from this follows:

$$\varrho_{11}^i = \varrho_{22}^i, \quad \zeta_{11}^i = \zeta_{22}^i.$$

It is worth while to mention the fact that in the levels $\pm\beta$ of the basic unit both the values of ϑ_1^{ij} and ϑ_2^{ij} are zero for all j -s. As a consequence all expressions

occurring in the perturbation formulae vanish as all of them are derived from the ϑ_{κ}^{ij} -s. This consideration remains valid even for the higher approximations, hence the levels $\pm\beta$ are not at all affected by the perturbation, the only difference being that they occur with the corresponding multiplicity: in the molecule containing n units the levels $+\beta$ and $-\beta$ occur n times. This result is in complete agreement with the conclusions of BRADBURN, COULSON and RUSHBROKE [4] who investigated the eigenvalues of the same compounds using RUTHERFORD's method [5]. From the above it follows that these levels do not contribute to the correction of the bond orders.

3. Results of calculation

Our results obtained by means of formulae (13) and (16) referring to the perturbation calculation of the eigenvalues are shown in Table I below. The bond lengths calculated with the use of bond orders (COULSON's semi-empirical method [6]) are illustrated in the Figure.

Both in the case of the eigenvalues and the bond lengths the calculations were performed for the following cases: *a*) The strength of the bond connecting the units is taken to be equal to the strength of other bonds ($\lambda = 1$). *b*) The results of the preceding calculation can be compared with those obtained by the straightforward application of the molecular orbital method (direct calculation) where the same assumptions were used. *c*) In the further calculation allowance was made for the fact that the strength of the bonds between the units is weaker than the strength of the other bonds. Accordingly, λ is taken to be 0.8. In the case of the eigenvalues the levels corresponding to states which are symmetrical and antisymmetrical, resp. with respect to the vertical axis are shown separately.

In Table I only the positive levels are shown. The absolute values of the negative levels are identical with those of the positive levels. The perturbation preserves the property of the levels characteristic for alternant hydrocarbons. The levels corresponding to $x = 1$ possessing the given multiplicity are not shown in Table I as their value does not change under the influence of the perturbation.

4. The discussion of the results

The results will be discussed from two points of view. On the one hand of the given example it will be examined to what extent the method elaborated in this paper is useful for the investigation of series, and further the dependence of the quantities occurring in the investigation of the polyyrene series on the parameter λ will be investigated. To judge the applicability of the method we have to compare the first and second columns of the Figure and Table I, respec-

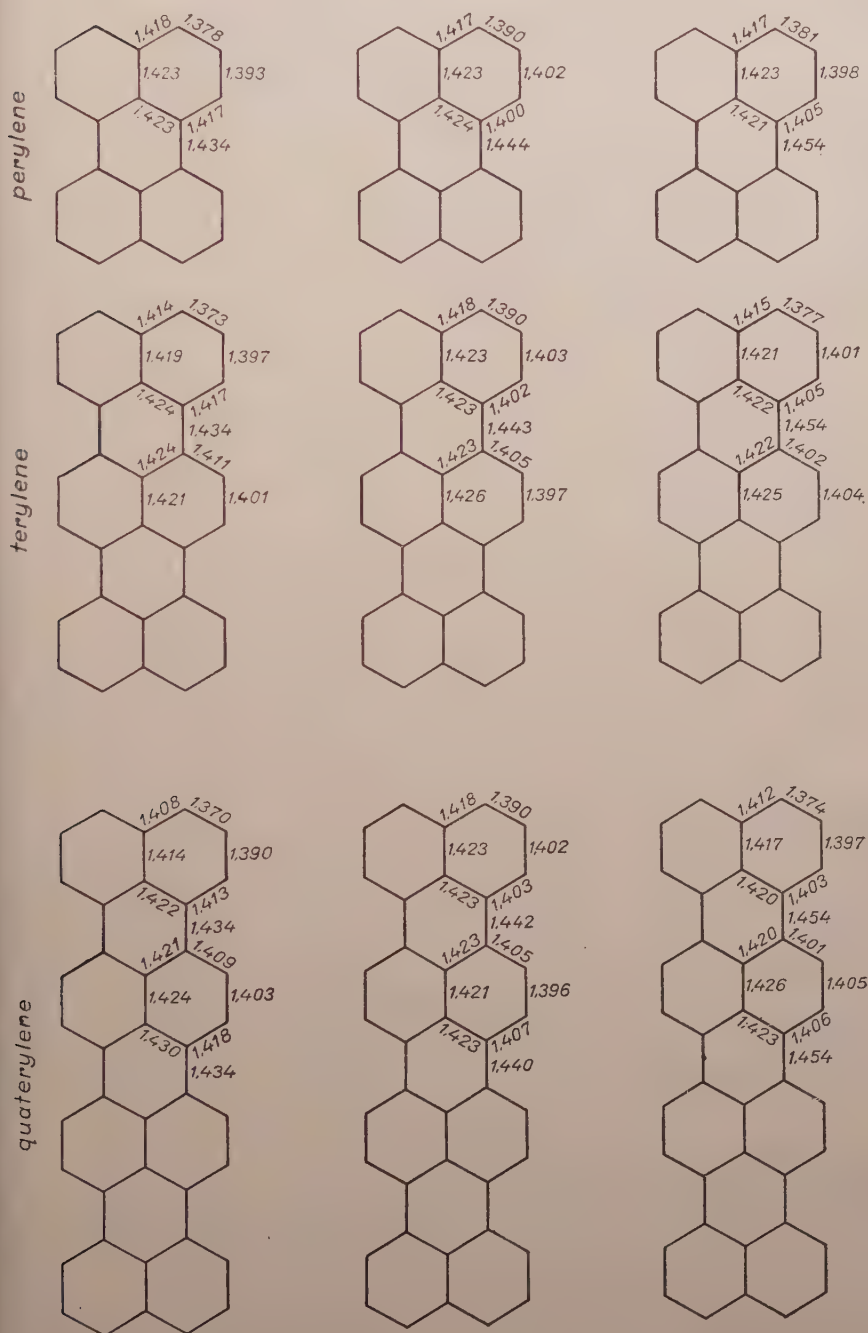


Fig. 1

Surveying the data of the Table it can be concluded that the eigenvalues calculated by means of the perturbation method show an acceptable agreement with the values calculated by the direct method using the same assumptions. In view of the fact that the calculation of the eigenvalues by means of the perturbation

Table I

Symmetrical levels			x_1	Antisymmetrical levels		
pert. ($\lambda = 1$)	($\lambda = 1$) direct	pert. ($\lambda = 0,8$)		pert. ($\lambda = 1$)	($\lambda = 1$) direct	pert. ($\lambda = 0,8$)
$n = 2$ perylene						
2,5642	2,5863	2,4990		1,8345	1,8794	1,7786
2,2030	2,1819	2,2100		1,5581	1,5321	1,5576
1,6195	1,5936	1,5566		1,0581	1	0,9575
0,9809	1	1,0458		0,3345	0,3474	0,3787
$n = 3$ terylene						
2,6650	2,6614	2,5690		1,8973	1,9419	1,8280
2,4324	2,4550	2,3857		1,7633	1,7709	1,7110
2,1442	2,1299	2,1604		1,5065	1,4970	1,5154
1,7677	1,7171	1,6726		1,2135	1,1361	1,0810
1,2656	1,2703	1,2790		0,7633	0,7092	0,7110
0,8647	0,8895	0,9502		0,1903	0,2410	0,2624
$n = 4$ quaterylene						
2,6907	2,6902	2,5978		1,9166	1,9659	1,8449
2,5613	2,5666	2,4861		1,8633	1,8649	1,7889
2,3379	2,3669	2,3073		1,6925	1,7044	1,6517
2,1061	2,1010	2,1302		1,4694	1,4780	1,4871
1,8458	1,7837	1,7330		1,2783	1,2053	1,1342
1,4659	1,4377	1,4387		1,0015	0,8914	0,8992
1,0713	1,1004	1,1231		0,5543	0,5473	0,5414
0,8130	0,8359	0,9064		0,1077	0,1845	0,1978

Table II

The wavelength corresponding to the first allowed transition ($m\mu$)

	direct ($\lambda = 1$)	pert. ($\lambda = 0,8$)	experiment
perylene	621	564	438
terylene	893	818	516
quaterylene ...	1168	1087	

method is very simple, it is worth while to use this treatment for a rapid approximative determination of the level-system of series.

The agreement in the case of the bond length is somewhat weaker but acceptable. The difference between the two results calculated by the two methods is not greater than the error occurring in the present experimental determination of bond lengths. The method is especially suitable for the investigation of the bond length of bonds connecting units as the calculation is relatively simple.

In making a comparison one must take into account the fact that the case $\lambda = 1$ is disadvantageous for the convergence of the perturbation treatment, in the case $\lambda < 1$ a better agreement can be expected. The other advantage of the use of the perturbation method consists in the fact that it renders easily possible the examination of the dependence on λ of the quantities characterising the molecule, i. e. the dependence on the strength of the bonds connecting the single units.

From this point of view the behaviour of the polyrylene series can be examined by comparing the second and third columns of Table I and the Figure, resp. For the eigenvalues it is found that for $\lambda = 0,8$ the distance of the highest and lowest occupied levels decreases as compared to the case $\lambda = 1$. The levels get closer to each other and simultaneously the distance corresponding to the first allowed transition increases. In Table II the wavelengths corresponding to the first allowed transition are summarized.

From the data it can be seen that parallel to the increasing of the bond length of the bonds connecting the units the wavelength corresponding to the first allowed transition decreases, that means a better result is obtained than in the calculation of PAUNCZ and WILHEIM. The magnitude of the decrease is, however, not yet big enough, because even in this case the wavelength of the first transition turns out to be too great. This shows that other factors besides that mentioned above have to be taken into account, in order to get an acceptable agreement with the experiment (configurational interaction, etc.)

The calculations relating to the bond lengths show that the bond lengths, mainly those within a unit, are not much affected by the perturbation.

Acknowledgement

The author expresses his sincere gratitude to Docent JÁNOS HORVÁTH, Director of the Institute, for useful advice in the writing of the paper.

APPENDIX

In the investigation of the eigenvectors using the perturbation method the following sums occur:

$$\sum_i^{\lambda\mu f} = \sum_{m \neq k}^n \frac{a_{k\lambda} a_{m\mu} a_{mf}}{(\cos ka - \cos ma)^i}, \quad a = \frac{\pi}{n+1}.$$

Their computation can be reduced to the evaluation of the followings sums :

$${}^{(i)}A_k^f = \sum_{m \neq k}^n \frac{\cos mfa}{(\cos ka - \cos ma)^i} . \quad (A)$$

In view of the fact that, beside the completion of the above-mentioned task, their use makes possible the evaluation of some quantities occurring in the perturbation treatment of the polymer their investigation seems useful.

From their definition the following properties follow :

$$\begin{aligned} a) \quad {}^{(i)}A_k^{-f} &= {}^{(i)}A_k^f . & b) \quad {}^{(i)}A_k^{n+1-f} &= \sum_{m \neq k}^n \frac{(-1)^m \cos mfa}{(\cos ka - \cos ma)^i} . \\ c) \quad {}^{(i)}A_k^{f-1} - 2 \cos ka {}^{(i)}A_k^f + {}^{(i)}A_k^{f+1} &= -2^{(i-1)}A_k^f . \end{aligned}$$

In the latter case the following identity was used :

$$\cos m(f-1)a - 2 \cos ka \cos mfa + \cos m(f+1)a = -2(\cos ka - \cos ma) \cos mfa .$$

With a) and c) is obtained for $f=0$

$${}^{(i)}A_k^1 = \cos ka \quad {}^{(i)}A_k^0 - (i-1)A_k^0 . \quad (A)$$

It is sufficient to evaluate ${}^{(i)}A_k^0$ as on this basis (knowing the value of ${}^{(i-1)}A_k^0$) from equation ${}^{(i)}A_k^1$, further using c) all others can be successively evaluated.

$$1. \quad {}^{(0)}A_k^0 = \sum_{m \neq k}^n \cos m0 \cdot a = n-1 , \quad (A)$$

$${}^{(0)}A_k^f = \sum_{m=1}^n \cos mfa - \cos Kfa = \begin{cases} -1 - \cos kfa , & \text{if } f \text{ is even,} \\ -\cos kfa , & \text{if } f \text{ is odd.} \end{cases} \quad (A)$$

2. For the evaluation of ${}^{(1)}A_k^0$ the fact is used that $\cos ka$ is the k -th root of the Tschelheff polynomial of n -th degree, of second kind.

$$U_n(\cos \vartheta) = \frac{\sin(n+1)\vartheta}{\sin \vartheta} . \quad (A)$$

With the use of the factored form of the polynomial

$$U_n(\cos \vartheta) = \prod_{m=1}^n (\cos \vartheta - \cos ma) \quad (A)$$

$$\sum_{m=1}^n \frac{1}{\cos \vartheta - \cos ma} = \frac{U'_n}{U_n} = g(\cos \vartheta) \quad (A)$$

is obtained, where

$$g(\cos \vartheta) = \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \left\{ \cos \vartheta - (n+1) \cos(n+1)\vartheta \cdot \frac{1}{U_n} \right\} . \quad (A)$$

The derivation occurs with respect to $x = \cos \vartheta$.)

On the basis of (7) $^{(1)}A_k^0$ can be obtained as follows:

$$^{(1)}A_k^0 = \lim_{\vartheta \rightarrow ka} \left(g(\cos \vartheta) - \frac{1}{\cos \vartheta - \cos ka} \right). \quad (A. 9)$$

The prescribed passage to limit can be performed with the repeated application of l'Hospital's rule, the result being:

$$^{(1)}A_k^0 = \frac{3}{2} \frac{\cos ka}{\sin^2 ka}, \quad (A. 10)$$

On the basis of equations (2), (3) and (10):

$$^{(1)}A_k^1 = -n + \frac{\cos^2 ka + 2}{2 \sin^2 ka}. \quad (A. 11)$$

In the following we shall verify that for $^{(1)}A_k^f$ the formula is valid:

$$^{(1)}A_k^f = [f - (n+1)sgf] \frac{\sin kfa}{\sin ka} + \frac{\cos kfa \cos ka + h}{2 \sin^2 ka}, \quad (A. 12)$$

where

$$h = \begin{cases} 2 \cos ka, & \text{if } f \text{ even,} \\ 2, & \text{if } f \text{ odd;} \end{cases} \quad sgf = \begin{cases} 1, & \text{if } f > 0, \\ 0, & \text{if } f = 0, \\ -1, & \text{if } f < 0. \end{cases}$$

For $f = 0$ and $f = 1$ formula (12) is the same as (10) and (11). To prove it one must only show that formula (12) satisfies equation c). Let f be even, then the following relation must be fulfilled:

$$^{(1)}A_k^{f-1} - 2 \cos ka \ ^{(1)}A_k^f + ^{(1)}A_k^{f+1} = 2 + 2 \cos kfa.$$

Substituting (12)

$$\begin{aligned} & [f - (n+1)sgf] \frac{1}{\sin ka} \left\{ \underbrace{\sin k(f-1)a - 2 \cos ka \sin kfa + \sin k(f+1)a}_{=0} \right\} - \\ & \frac{\sin k(f-1)a - \sin k(f+1)a}{\sin ka} + \frac{\cos ka}{2 \sin^2 ka} \left\{ \underbrace{\cos k(f-1)a - 2 \cos ka \cos kfa + \cos k(f+1)a}_{=0} \right\} + \\ & + \frac{4 - 4 \cos^2 ka}{2 \sin^2 ka} = 2 + 2 \cos kfa \end{aligned}$$

is obtained.

Thus the correctness of the formula is proved. In a completely analogous manner the proof can also be performed in the case of odd f .

3. The calculation of $^{(2)}A_k$ occurs in a manner analogous to the procedure given in detail above. By means of equation (7):

$$\sum_{m=1}^n \frac{1}{(\cos \vartheta - \cos ma)^2} = -g'(\cos \vartheta), \quad (A. 13)$$

$$^{(2)}A_k^0 = \lim_{\vartheta \rightarrow ka} \left\{ -g'(\cos \vartheta) - \frac{1}{(\cos \vartheta - \cos ka)^2} \right\}.$$

The limit operation gives the following result :

$${}^{(2)}A_k^0 = \frac{4(n+1)^2 + 17}{12 \sin^2 ka} - \frac{11}{4 \sin^4 ka} . \quad (A. 9)$$

Using equations (2), (10) and (16) the following is obtained :

$${}^{(2)}A_k^1 = \frac{4(n+1)^2 - 1}{12 \sin^2 ka} \cos ka - \frac{11 \cos ka}{4 \sin^4 ka} . \quad (A. 10)$$

The formula for ${}^{(2)}A_k^f$ for arbitrary f is as follows :

$$\begin{aligned} {}^{(2)}A_k^{ff} = & \frac{4(n+1)^2 - 12f(n+1)sgf + 6f^2 + 53}{12 \sin^2 ka} \cos kfa + \frac{(n-3)sgf - f}{\sin^3 ka} \cdot \cos ka \sin kfa \\ & - \frac{11 \cos kfa}{4 \sin^4 ka} + \frac{2 \cos (|f| - 2)ka}{\sin^4 ka} + h^{(2)} , \\ h^{(2)} = & \begin{cases} -\frac{3 + \cos 2ka}{2 \sin^4 ka} , & \text{if } f \text{ is even ,} \\ -\frac{2 \cos ka}{\sin^4 ka} , & \text{if } f \text{ is odd.} \end{cases} \end{aligned} \quad (A. 11)$$

The demonstration of formula (16) occurs in the same manner as that of (12) above. Substituting $f=0$ and $f=1$, equations (14) and (15) are obtained. In the further steps using simple trigonometrical relations it can be proved that (16) satisfies the following equation :

$${}^{(2)}A_k^{f-1} - 2 \cos ka {}^{(2)}A_k^f + {}^{(2)}A_k^{f+1} = -2 {}^{(1)}A_k^f .$$

On the basis of (12) and (16) all $\Sigma_2^{\lambda f}$ occurring in the second-order perturbation calculation can be calculated. The results are given below.

$$\begin{aligned} & (n+1)sgf - 2f \equiv g \\ & \left. \begin{aligned} \sum_1^{11f} + \sum_1^{nnf} &= \frac{1}{n+1} \left\{ (g-1) a_{kf+1} - (g+1) a_{kf-1} \right\} , \\ \sum_1^{11f} - \sum_1^{nnf} &= sgf \left\{ a_{kf+1} - a_{kf-1} \right\} . \end{aligned} \right\} \quad (A. 12) \\ & \left. \begin{aligned} \sum_1^{12f} + \sum_1^{nn-1f} &= \frac{1}{n+1} \left\{ (g-3) a_{kf+2} + 2 a_{kf} - (g+3) a_{kf-2} \right\} , \\ \sum_1^{12f} - \sum_1^{nn-1f} &= sgf \left\{ a_{kf+2} - a_{kf-2} \right\} . \end{aligned} \right\} \quad (A. 13) \\ & \left. \begin{aligned} \sum_1^{21f} + \sum_1^{n-1nf} &= \frac{1}{n+1} \left\{ (g-1) a_{kf+2} - 2 a_{kf} - (g+1) a_{kf-2} \right\} , \\ \sum_1^{21f} - \sum_1^{n-1nf} &= sgf \left\{ a_{kf+2} - a_{kf-2} \right\} . \end{aligned} \right\} \quad (A. 14) \\ & \left. \begin{aligned} \sum_2^{11f} + \sum_2^{nnf} &= \frac{1}{n+1} \left\{ \frac{3(n+1-f)^2 - 2(n+1)^2 + 3f^2 - 1}{3} + \frac{1}{\sin^2 ka} \right\} a_{kf} , \\ \sum_2^{11f} - \sum_2^{nnf} &= (n+1-2f) a_{kf} . \end{aligned} \right\} \quad (A. 15) \end{aligned}$$

REFERENCES

- C. A. COULSON and G. S. RUSHBROKE, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **44**, 272, 1948.
E. M. CORSON, *Perturbation methods in the quantum mechanics of n-electron systems*, p. 84. Blackie and Son, London, 1948.
R. PAUNCZ and I. WILHEIM, *MTA VII. Oszt. Közl.*, **7**, 269, 1956.
M. BRADBURN, C. A. COULSON and G. S. RUSHBROKE, *Proc. Roy. Soc. Ed. A*, **62**, 336, 1948.
D. E. RUTHERFORD, *Proc. Roy. Soc. Ed. A*, **62**, 229, 1947.
R. PAUNCZ and F. BERENCZ, *Acta Chim. Hung.*, **3**, 261, 1953.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАЛЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ ПРИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОМ ИССЛЕДОВАНИИ СИСТЕМ, СОСТОЯЩИХ ИЗ ТОЖДЕСТВЕННЫХ ЧАСТЕЙ

Р. ПАУНЦ

Резюме

В работе дается исследование молекулы, состоящей из тождественных элементарных единиц, методом малых возмущений. С помощью рассуждений, опирающихся на простой вариант метода молекулярной траектории, удастся разделить результат на сумму произведений, как в случае значения энергии, так и порядка связи. Один из сомножителей содержит только такие данные, которые относятся к основному элементу, а другой сомножитель зависит от данных ряда.

Во второй части показана применимость этого метода на примере полириленового ряда. Результат расчета показывает, что метод применим с успехом и с его помощью можно исследовать, каким образом зависят характеристики ряда от прочности связи между отдельными элементами.

DIE BERECHNUNGEN DES GRUNDZUSTANDES DES WASSERSTOFFMOLEKÜLS AUF GRUND DES VARIATIONSVERFAHRENS

Von

F. BERENCZ

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER UNIVERSITÄT, SZEGED

(Vorgelegt von P. Gombás. — Eingegangen: 9. IV. 1956)

Die Bindungsenergie für den Grundzustand des Wasserstoffmoleküls wurde auf Grund des Variationsverfahrens mit einer allgemeinen Eigenfunktion berechnet, die sich aus der von WEINBAUM verwendeten Hund-Mullikenschen Näherungseigenfunktion so ergibt, dass in diese anstatt der effektiven Kernladungszahl zwei Variationsparameter eingeführt werden. Die Berechnungen werden auf zweierlei Weisen durchgeführt: einerseits mit einer Eigenfunktion ohne den Korrelationsfaktor, andererseits mit einer durch den Korrelationsfaktor erweiterten Eigenfunktion. Das mit der letzteren Eigenfunktion erhaltene Resultat weicht vom empirischen Wert um 10,3% ab. Die Eigenfunktion, da sie nur wenige Variationsparameter enthält, ist verhältnismässig einfach: sie ist daher zur Bestimmung der Dissoziationsenergie komplizierter Moleküle verwendbar.

Einleitung

Eine der erfolgreichsten Lösungsmethoden des wellenmechanischen Mehrteilchenproblems ist das Variationsverfahren. In der Quantenchemie gibt es bei der Anwendung dieses Näherungsverfahrens zweierlei Möglichkeiten. Die eine besteht darin, dass man von einem den Rand- und Orthogonalitätsbedingungen genügenden vollständigen Funktionensystem ausgeht und aus diesem die unbekannte Eigenfunktion als Linearkombination bildet, deren Koeffizienten mit der Ritzschen Methode bestimmt werden [1]. Dieses Verfahren ist im wesentlichen eine mathematische Approximation. Man erzielt eine möglichst rasche Konvergenz, wenn die Elemente des vollständigen Funktionensystems, die den Unterraum des totalen Funktionenraumes bilden, der die gesuchte Näherungseigenfunktion enthält, gefunden wurden, oder mindestens die Quadratsumme der Koeffizienten nahe eins ist. Im entgegengesetzten Falle hat man es mit einer ausserordentlich vielgliedrigen Reihe zu tun. Die Befolgung dieses Weges bedeutet also bei komplizierteren Molekülen ernsthafte rechnerische Schwierigkeiten. Wenn es auch gelingt, durch die geeignete Wahl der Elemente des Funktionensystems dem Verfahren eine möglichst rasche Konvergenz zu sichern, so hat doch die Methode den grossen Nachteil, dass die Eigenschaften der geprüften Eigenfunktion nicht genug klar zum Ausdruck gebracht werden.

Die andere Möglichkeit besteht darin, dass man nicht unbedingt von einem vollständigen Funktionensystem ausgeht, sondern eine solche Funktionenform anzugeben trachtet, die sich der Natur des Problems möglichst gut anpasst;

die in der Funktion vorkommenden Parameter werden auf Grund des Variationsverfahrens bestimmt. In dieser Arbeit befolgen wir bei den Berechnungen den Grundzustand des Wasserstoffmoleküls diesen Weg. Dieses Verfahren hat den Vorteil, dass man eine leichtere Übersicht über die Näherungseigenfunktion bekommt, es hat aber den Nachteil, dass nicht gesichert ist, ob die Probeeigenfunktion die exakte Eigenfunktion in hinreichendem Grade approximiert. Die Fehlerabschätzungsformel von JAMES-COOLIDGE [2] gibt aber, wenn man die Energiewerte (welche spektroskopisch bestimmt werden können) kennt, eine Möglichkeit zur Beurteilung des Fehlers der Näherungseigenfunktion.

Die Bestimmung der Bindungsenergie

Die Bindungsenergie eines Moleküls ergibt sich, indem man von der totalen Energie des Moleküls die Energie der das Molekül aufbauenden Atome subtrahiert. Im allgemeinen stimmt diese mit der Dissoziationsenergie des Moleküls nicht überein, da man auch drei andere Wirkungen berücksichtigen muss [3] nämlich:

1. die Nullpunktsschwingungsenergie,
2. die Rotationsenergie und
3. die Translationsenergie.

Die oben erwähnten Korrekturen sind aber in Bezug auf das Wasserstoffmolekül ziemlich klein; die bedeutsamste, die von der Nullpunktsschwingung her rührende Korrektur, beläuft sich nur auf den 125-ten Teil der ganzen Elektronenenergie. Darum ist es im allgemeinen bei der Bestimmung der Dissoziationsenergie auf Grund der Näherungsmethoden nicht üblich, dieselben zu berücksichtigen.

Die Dissoziationsenergie des Wasserstoffmoleküls ergibt sich aus dem Zusammenhang

$$D = |E_{\min} - 2 E_1|,$$

wo E_{\min} die totale Energie des Wasserstoffmoleküls und E_1 die Energie des Wasserstoffatoms für den Grundzustand bezeichnet (in atomaren Einheiten ist $E_1 = -\frac{1}{2}$). Zur Bestimmung von E_{\min} ist eine der gebräuchlichsten Methoden das Variationsverfahren, welches aus der Bestimmung des Minimums des Energieausdruckes

$$E = \frac{\int \psi^* \mathbf{H} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} \quad (1)$$

durch Variation verschiedener Parameterwerte besteht. Die Arbeiten der einzelnen Verfasser unterscheiden sich durch die ihren Rechnungen zugrunde lie-

enden Eigenfunktionen ψ und der Anzahl der verwendeten Parameterwerte. Die mittels des Variationsverfahrens bezüglich des Wasserstoffmoleküls durchgeführten Berechnungen kann man in zwei grosse Gruppen einteilen danach, ob die den Berechnungen zugrunde liegenden Eigenfunktionen den Korrelationsfaktor enthalten oder nicht. Diese Gruppen sind in den Tabellen I und II dargestellt. In den Tabellen werden die folgenden Bezeichnungen benutzt:

$$\varphi \equiv \psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_b(1) \psi_a(2),$$

$$\chi \equiv \psi_a(1) \psi_a(2) + \psi_b(1) \psi_b(2).$$

Die Rechnungsmethode

Beim Konstruieren der neuen Funktionenform war unser Ziel eine verhältnismässig einfache Eigenfunktion zu bilden, die auch zur Bestimmung der physikalischen Konstanten komplizierterer Moleküle brauchbar ist. Wir gingen zu derselben auf Grund folgender Überlegungen: Aus unseren früheren Untersuchungen [17] wussten wir, dass die Erweiterung der Eigenfunktion durch den Korrelationsfaktor $(1 + pr_{12})$ auch im Falle einer Näherungseigenfunktion, in welcher ursprünglich gar keine Korrelation der Elektronen vorhanden war, eine wesentliche Dissoziationsenergiekorrektur ergibt. Da die Hund-Mullikensche Eigenfunktion

$$\Psi = N [\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_b(1) \psi_a(2) + \psi_a(1) \psi_a(2) + \psi_b(1) \psi_b(2)] \quad (2)$$

als Gesamtelektroneneigenfunktion — auf Grund der Methode der Molekülbahn als Produkt der Einelektroneneigenfunktionen

$$\psi_1 = \psi_a(1) + \psi_b(1),$$

$$\psi_2 = \psi_a(2) + \psi_b(2)$$

dargestellt werden kann:

$$\Psi = N \psi_1 \psi_2 = [\psi_a(1) + \psi_b(1)] [\psi_a(2) + \psi_b(2)] \quad (3)$$

und die Methode der Molekülbahn annimmt, dass zwischen den Elektronen keine Wechselwirkung vorhanden ist, kann in der Hund-Mullikenschen Eigenfunktion eine Korrelation der Elektronen vorhanden sein. Deshalb basieren wir unsere Rechnungen auf die Hund-Mullikensche Eigenfunktion. Andererseits aber war durch WEINBAUMS Berechnungen [4] [8] auch die Tatsache bekannt, dass die Dissoziationsenergie des Wasserstoffmoleküls von der effektiven Kernladung

sehr empfindlich abhängt. (Durch Variation von z erreicht er 4 eV für die Dissoziationsenergie, und ohne Variation von z mit derselben Eigenfunktion nur 3,27 eV). Deshalb wenn man in (3) von den rechtwinkligen Koordinaten zu den sich der Natur des Problems möglichst gut anpassenden elliptischen Koordinaten übergeht:

$$\psi_a = e^{-zr_a} = e^{-z \frac{R}{2} (\mu + \nu)},$$

$$\psi_b = e^{-zr_b} = e^{-z \frac{R}{2} (\mu - \nu)},$$

wo

$$\mu = \frac{r_a + r_b}{R}, \quad \nu = \frac{r_a - r_b}{R}$$

und die Koeffizienten von μ und ν abgesehen vom Vorzeichen sich identisch ergeben, führt man anstatt derselben zwei neue Variationsparameter ein, α und β :

$$e^{-z \frac{R}{2} (\mu + \nu)} \rightarrow e^{-(\alpha\mu + \beta\nu)},$$

$$e^{-z \frac{R}{2} (\mu - \nu)} \rightarrow e^{-(\alpha\mu - \beta\nu)},$$

was physikalisch soviel bedeutet, dass mit wachsendem α bzw. β die Elektronenladungsdichte entlang der Kernverbindungsline bzw. um die Kerne sich ausdehnt vergrößert. Unsere neue Eigenfunktion erhält also die folgende Gestalt:

$$\Psi = N e^{-\alpha(\mu_1 + \mu_2)} [e^{\beta(\nu_1 + \nu_2)} + e^{-\beta(\nu_1 + \nu_2)} + e^{\beta(\nu_1 - \nu_2)} + e^{-\beta(\nu_1 - \nu_2)}]. \quad (4)$$

Es sollen folgende Bezeichnungen eingeführt werden:

$$\Psi = N \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5), \quad (5)$$

wo

$$\psi_1 = e^{-\alpha(\mu_1 + \mu_2)},$$

$$\psi_2 = e^{\beta(\nu_1 + \nu_2)},$$

$$\psi_3 = e^{-\beta(\nu_1 + \nu_2)},$$

$$\psi_4 = e^{\beta(\nu_1 - \nu_2)},$$

$$\psi_5 = e^{-\beta(\nu_1 - \nu_2)}.$$

Der Energieausdruck, der zum Minimum gemacht werden soll, wird nach (1) mit (5) folgendermassen gebildet:

$$E = \frac{\int \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) \mathbf{H} \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) d\tau_1 d\tau_2}{\int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 d\tau_1 d\tau_2}, \quad (6)$$

o H den wellenmechanischen Hamilton-Operator des Systems bezeichnet, welcher im Falle eines Wasserstoffmoleküls in atomaren Einheiten von der folgenden Gestalt ist:

$$H = - \left[\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{r_{a1}} + \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{b2}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R} \right]. \quad (7)$$

lit (7) kann man (6) folgenderweise schreiben:

$$E = \frac{K_0 - P_0 + I_{-1}}{I_0} + \frac{1}{R},$$

$$K_0 = - \frac{1}{2} \int \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) d\tau_1 d\tau_2,$$

$$P_0 = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 \left(\frac{1}{r_{a1}} + \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{b2}} \right) d\tau_1 d\tau_2,$$

$$I_0 = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 d\tau_1 d\tau_2,$$

$$I_{-1} = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 \frac{1}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2.$$

lit der obigen Eigenfunktion ergeben sich für den Grundzustand des Wasserstoffmoleküls die folgenden Resultate:

$$D = 3,60 \text{ eV}, \quad R = 0,76 \text{ Å}, \quad \alpha = 0,855, \quad \alpha = 0,753.$$

Wenn wir unsere Resultate mit [6] vergleichen, ist ersichtlich, das wenn zwei variierbare Parameter anstatt der effektiven Kernladungszahl in die Eigenfunktion eingebaut werden, die Dissoziationsenergie sich um 3,7% verbessert. Gegenüber ist unser Resultat um 0,4 eV schlechter als [8]. Diesen letzteren Dissoziationsenergiewert erhielt WEINBAUM mit dem Zweiparametervariationsverfahren, wenn in der Näherungsfunktion ausser der effektiven Kernladungszahl noch der Faktor variiert wird, welcher das Verhältniss des homöpolaren Zustandes zu dem heteropolaren Zustande reguliert. WEINBAUMS Resultat ist deshalb besser als unseres, weil die durch die Glieder $\psi_a(1)\psi_a(2)$ und $\psi_b(1)\psi_b(2)$ charakterisierten Zustände in der Eigenfunktion nicht sehr stabil sind.

Die Erweiterung der obigen Eigenfunktion durch den Korrelationsfaktor $(1 + p r_{12})$

Weiterhin soll geprüft werden, wie sich der Wert der Dissoziationsenergie verbessert, wenn die obige Eigenfunktion durch den Korrelationsfaktor $(1 + p r_{12})$ erweitert wird :

$$\Psi = N \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) (1 + p r_{12}),$$

wo p einen neuen Variationsparameter bedeutet. Jetzt handelt es sich nicht wie früher um ein Zweiparametervariationsverfahren sondern um ein Dreiparametervariationsverfahren.

Der Energieausdruck, der ein Minimum werden soll, ist jetzt :

$$E = \frac{\int \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) (1 + p r_{12}) \mathbf{H} \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) (1 + p r_{12}) d\tau_1 d\tau_2}{\int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 (1 + p r_{12})^2 d\tau_1 d\tau_2}.$$

Mit (7) kann man (9) folgenderweise schreiben :

$$E = \frac{A + 2pB + p^2C}{I_0 + 2pI_1 + p^2I_2} + \frac{1}{R},$$

wo

$$A = K_0 - P_0 + I_{-1},$$

$$B = K_1 - P_1 + I_0,$$

$$C = K_2 - P_2 + I_1;$$

$$K_0 = -\frac{1}{2} \int \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) d\tau_1 d\tau_2,$$

$$K_1 = -\frac{1}{2} \int \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) r_{12} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) d\tau_1 d\tau_2,$$

$$K_2 = -\frac{1}{2} \int \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) r_{12} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \psi_1 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) r_{12} d\tau_1 d\tau_2,$$

$$P_i = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 \left(\frac{1}{r_{a1}} + \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{b2}} \right) r_{12}^i d\tau_1 d\tau_2, \quad i = 0, 1, 2,$$

$$I_i = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 r_{12}^i d\tau_1 d\tau_2, \quad i = -1, 0, 1,$$

Mit der obigen Eigenfunktion ergeben sich auf Grund des Variationsverfahrens die folgenden Resultate :

$$D = 4,26 \text{ eV}, \quad R = 0,76 \text{ \AA}, \quad \alpha = 0,925, \quad \beta = 0,840, \quad p = 0,32.$$

Die Erweiterung der obigen Eigenfunktion durch den Korrelationsfaktor ergibt eine Dissoziationsenergiekorrektur um 18,3%.

Das für die Dissoziationsenergie mit der obigen Eigenfunktion erhaltene Resultat ist um 0,16 eV bzw. um 0,10 eV besser als das mit der WIENBAUMSchen [8] Drei- bzw. mit der HIRSCHFELDER-LINNETSchen [11] Vierparametereigenfunktion ohne Korrelationsfaktor erhaltene Resultat. Unter den auf Grund der durch den Korrelationsfaktor erweiterten Eigenfunktionen berechneten Dissoziationsenergiewerten ist das obige Resultat um 0,15 eV besser als GROSS-BRAUNSTEINS [14] Resultat und nur um 0,46 eV schlechter als JAMES-COOLIDGES Resultat, das gleichzeitig mit dem empirischen Wert übereinstimmt. Diese letztere Tatsache wird sogleich verständlich, wenn wir bedenken, dass JAMES und COOLIDGE ihr Resultat nicht wie wir mit drei Variationsparametern sondern mit 13 Variationsparametern erhielten.

Die neue Eigenfunktion ist verhältnismässig einfach, da sie nur wenige Variationsparameter enthält, so dass sie zur Berechnung physikalischer Konstanten komplizierterer Moleküle verwendet werden kann.

Ich danke auch an dieser Stelle Dozenten J. HORVÁTH aufrichtig für die Durchsicht des Manuskriptes und J. ILLY für die Durchführung der Kontrollrechnungen der Integrale und für die Hilfe bei den numerischen Rechnungen.

ANHANG

Die Berechnungen der Integrale

Unter den in den Energieausdrücken, die zum Minimum gemacht werden sollen, sind diejenigen neu, in welchen der Integrand r_{12}^n enthält. Dieselben können in die folgenden zwei Gruppen eingeteilt werden:

$$I_{iklm}^n = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5)^2 \mu_1^i \mu_2^k v_1^l v_2^m r_{12}^n d\tau_1 d\tau_2,$$

$$J_{iklm}^n = \int \psi_1^2 (\psi_2 + \psi_3 + \psi_4 + \psi_5) (\psi_2 \pm \psi_3 - \psi_4 \mp \psi_5) \mu_1^i \mu_2^k v_1^l v_2^m r_{12}^n d\tau_1 d\tau_2$$

$$i, k, l, m, n = 0, 1, 2$$

sein kann.

Bei der Berechnung der Integrale wird der in elliptischen Koordinaten ausgedrückte Wert von r_{12}^2 verwendet:

$$r_{12}^2 = \frac{R^4}{4} \left[\mu_1^2 + v_1^2 + \mu_2^2 + v_2^2 - 2\mu_1 v_1 \mu_2 v_2 - 2 - 2 \sqrt{(\mu_1^2 - 1)(1 - v_1^2)(\mu_2^2 - 1)(1 - v_2^2)} (\cos \varphi_1 - \varphi_2) \right],$$

sowie die NEUMANNsche Reihenentwicklung [18] :

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{2}{R} \sum_{\tau=0}^{\infty} \sum_{\nu=0}^{\infty} D_{\tau\nu} Q_{\tau}^{\nu}(\mu_{+}) P_{\tau}^{\nu}(\mu_{-}) P_{\tau}^{\nu}(\nu_1) P_{\tau}^{\nu}(\nu_2) \cos \nu (\varphi_1 - \varphi_2),$$

wo

$$D_{\tau 0} = 2\tau + 1,$$

$$D_{\tau\nu} = (-1)^{\nu} 2(2\tau + 1) \left[\frac{(\tau - \nu)!}{(\tau + \nu)!} \right]^2, \quad \nu \geq 1.$$

μ_{+} und μ_{-} bezeichnen den grösseren, bzw. den kleineren Wert von μ_1 und μ_2 . P_{τ}^{ν} und Q_{τ}^{ν} bedeuten Legendreschen Polynome erster und zweiter Art. Wird das Integrand mit dem oben angegebenen Ausdruck für r_{12} und r_{12}^2 multipliziert, so bekommt man ein Polynom von sechs Integrationsvariablen ($\mu_1, \nu_1, \varphi_1, \mu_2, \nu_2, \varphi_2$) und die Integration wird in gewöhnlicher Weise sukzessiv durchführbar.

Bei der Durchführung der Integrationen werden die folgenden grundlegenden Integrale verwendet :

$$A_n(\alpha) = \int_1^{\infty} e^{-\alpha\mu} \mu^n d\mu,$$

$$B_n(\beta) = \int_{-1}^1 e^{-\beta\nu} \nu^n d\nu,$$

$$G_{\tau}^{\nu}(l, \beta) = \int_{-1}^1 P_{\tau}^{\nu}(\nu_i) e^{-\beta\nu_i} \nu_i^l (1 - \nu_i)^{\frac{\nu}{2}} d\nu_i,$$

$$W_{\tau}^{\nu}(i, k, \alpha) = \int_1^{\infty} \int_1^{\infty} Q_{\tau}^{\nu}(\mu_{+}) P_{\tau}^{\nu}(\mu_{-}) e^{-\alpha(\mu_1 + \mu_2)} \mu_1^i \mu_2^k (\mu_1^2 - 1)^{\frac{\nu}{2}} (\mu_2^2 - 1)^{\frac{\nu}{2}} d\mu_1 d\mu_2.$$

Die numerischen Werte der obigen Grundintegrale wurden von KOTANI, AMEMIYA und SIMOSE [19] in Tafeln zusammengestellt.

Die neuen Integrale ergaben sich wie folgt :

$$\begin{aligned} I_{0200}^1 = \frac{R\pi^2}{8} & \left\{ [W_0^0(2,2,2\alpha) + W_0^0(0,4,2\alpha) - 2W_0^0(0,2,2\alpha)] [G_0^0(0,2\beta)(G_0^0(0,2\beta) \right. \\ & + 4) + 4] + 5[W_2^0(2,2,2\alpha) + W_2^0(0,4,2\alpha) - 2W_2^0(0,2,2\alpha)] G_2^0(0,2\beta) + \\ & + 9[W_4^0(2,2,2\alpha) + W_4^0(0,4,2\alpha) - 2W_4^0(0,2,2\alpha)] G_4^0(0,2\beta) + \\ & \left. + 2W_0^0(0,2,2\alpha) \left[G_0^0(0,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2G_0^0(2,2\beta) + \frac{4}{3} \right] \right\} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 10 W_2^0(0,2,2\alpha) G_2^0(0,2\beta) \left[G_2^0(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right] + \\
& + 18 W_4^0(0,2,2\alpha) G_4^0(0,2\beta) G_4^0(2,2\beta) - \\
& - 6 W_1^0(1,3,2\alpha) \left[G_1^0(1,2\beta) \left(G_1^0(1,2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{9} \right] - \\
& - 14 W_3^0(1,3,2\alpha) \overset{2}{G}_3^0(1,2\beta) + \\
& + \frac{3}{2} W_1^1(0,2,2\alpha) \left[G_1^1(0,2\beta) \left(G_1^1(0,2\beta) + \frac{8}{3} \right) + \frac{16}{9} \right] + \\
& + \frac{7}{72} W_3^1(0,2,2\alpha) \overset{2}{G}_3^1(0,2\beta) \Big\} .
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{1200}^1 = \frac{R\pi^2}{8} \Big\{ & [W_0^0(2,3,2\alpha) + W_0^0(1,4,2\alpha) - 2W_0^0(1,2,2\alpha)] [G_0^0(0,2\beta) (G_0^0(0,2\beta) + \\
& + 4) + 4] + 5 [W_2^0(2,3,2\alpha) + W_2^0(1,4,2\alpha) - 2W_2^0(1,2,2\alpha)] G_2^0(0,2\beta) + \\
& + 9 [W_4^0(2,3,2\alpha) + W_4^0(1,4,2\alpha) - 2W_4^0(1,2,2\alpha)] \overset{2}{G}_4^0(0,2\beta) + \\
& + 2 W_0^0(1,2,2\alpha) \left[G_0^0(0,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 G_0^0(2,2\beta) + \frac{4}{3} \right] + \\
& + 10 W_2^0(1,2,2\alpha) G_2^0(0,2\beta) \left(G_2^0(0,2\beta) + \frac{4}{15} \right) + \\
& + 18 W_4^0(1,2,2\alpha) G_4^0(0,2\beta) G_4^0(2,2\beta) - \\
& - 6 W_1^0(2,3,2\alpha) \left[G_1^0(1,2\beta) \left(G_1^0(1,2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{9} \right] - \\
& - 14 W_3^0(2,3,2\alpha) \overset{2}{G}_3^0(1,2\beta) + \\
& + \frac{3}{2} W_1^1(1,2,2\alpha) \left[G_1^1(0,2\beta) \left(G_1^1(0,2\beta) + \frac{8}{3} \right) + \frac{16}{9} \right] + \\
& + \frac{7}{72} W_3^1(1,2,2\alpha) \overset{2}{G}_3^1(0,2\beta) \Big\} .
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{2200}^1 = & \frac{R\pi^2}{8} \left\{ 2 [W_0^0(2,4,2\alpha) - W_0^0(2,2,2\alpha)] [G_0^0(0,2)(G_0^0(0,2\beta) + 4) + 4] + \right. \\
& + 10 [W_2^0(2,4,2\alpha) - W_2^0(2,2,2\alpha)] G_2^0(0,2\beta) + \\
& + 18 [W_4^0(2,4,2\alpha) - W_4^0(2,2,2\alpha)] G_4^0(0,2\beta) + \\
& + 2 W_0^0(2,2,2\alpha) \left[G_0^0(0,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 G_0^0(2,2\beta) + \frac{4}{3} \right] + \\
& + 10 W_2^0(2,2,2\alpha) G_2^0(0,2\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right) + \\
& + 18 W_4^0(2,2,2\alpha) G_4^0(0,2\beta) G_4^0(2,2\beta) - \\
& - 6 W_1^0(3,3,2\alpha) \left[G_1^0(1,2\beta) \left(G_1^0(1,2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{9} \right] - \\
& - 14 W_3^0(3,3,2\alpha) G_3^0(1,2\beta) + \\
& + \frac{3}{2} W_1^1(2,2,2\alpha) \left[G_1^1(0,2\beta) \left(G_1^1(0,2\beta) + \frac{8}{3} \right) + \frac{16}{9} \right] + \\
& \left. + \frac{7}{72} W_3^1(2,2,2\alpha) G_3^1(0,2\beta) \right\}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{1002} = & \frac{R\pi^2}{8} \left\{ [W_0^0(0,3,2\alpha) + W_0^0(1,2,2\alpha) - 2 W_0^0(0,1,2\alpha)] \right. \\
& \left[G_0^0(0,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 G_0^0(2,2\beta) + \frac{4}{3} \right] + \\
& + 5 [W_2^0(0,3,2\alpha) + W_2^0(1,2,2\alpha) - 2 W_2^0(0,1,2\alpha)] \\
& G_2^0(0,2\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right) + \\
& + 9 [W_4^0(0,3,2\alpha) + W_4^0(1,2,2\alpha) - 2 W_4^0(0,1,2\alpha)] G_4^0(0,2\beta) G_4^0(2,2\beta) + \\
& + W_0^0(0,1,2\alpha) \left[G_0^0(0,2\beta) \left(G_0^0(4,2\beta) + \frac{2}{5} \right) + 2 G_0^0(4,2\beta) + \right. \\
& \left. + \frac{4}{5} + G_0^0(2,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{9} \right] + \\
& + 5 W_2^0(0,1,2\alpha) \left[G_2^0(0,2\beta) \left(G_2^0(4,2\beta) + \frac{8}{35} \right) + \right. \\
& \left. + G_2^0(2,2\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{8}{15} \right) + \frac{16}{225} \right] +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 9 W_4^0(0,1,2 \alpha) \left[G_4^0(0,2 \beta) \left(G_4^0(4,2 \beta) + \frac{16}{315} \right) + G_4^0(2,2 \beta) \right] - \\
& - 6 W_1^0(1,2,2 \alpha) \left[G_1^0(3,2 \beta) \left(G_1^0(1,2 \beta) + \frac{2}{3} \right) + \frac{2}{5} G_1^0(1,2 \beta) + \frac{4}{15} - \right. \\
& \quad \left. 14 W_3^0(1,2,2 \alpha) \left[G_3^0(1,2 \beta) \left(G_3^0(3,2 \beta) + \frac{4}{35} \right) \right] + \right. \\
& \quad + \frac{3}{2} W_1^1(0,1,2 \alpha) \left[G_1^1(2,2 \beta) \left(G_1^1(0,2 \beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{15} G_1^1(0,2 \beta) + \frac{16}{45} \right] + \\
& \quad \left. + \frac{7}{72} W_3^1(0,1,2 \alpha) G_3^1(0,2 \beta) \left(G_3^1(2,2 \beta) + \frac{16}{35} \right) \right] \Bigg\}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{0220}^1 = \frac{R\tau^2}{8} \Bigg\{ & [W_0^0(2,2,2 \alpha) + W_0^0(0,4,2 \alpha) - 2 W_0^0(0,2,2 \alpha)] \\
& \left[G_0^0(0,2 \beta) \left(G_0^0(2,2 \beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 G_0^0(2,2 \beta) + \frac{4}{3} \right] + \\
& + 5 [W_2^0(2,2,2 \alpha) + W_2^0(0,4,2 \alpha) - 2 W_2^0(0,2,2 \alpha)] G_2^0(0,2 \beta) \\
& \left(G_2^0(2,2 \beta) + \frac{4}{15} \right) + 9 [W_4^0(2,2,2 \alpha) + W_4^0(0,4,2 \alpha) - 2 W_4^0(0,2,2 \alpha)] \\
& G_4^0(0,2 \beta) G_4^0(2,2 \beta) + W_0^0(0,2,2 \alpha) \left[G_0^0(0,2 \beta) \left(G_0^0(4,2 \beta) + \frac{2}{5} \right) + \right. \\
& + 2 G_0^0(4,2 \beta) + \frac{4}{5} + G_0^0(2,2 \beta) \left(G_0^0(2,2 \beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{9} \Bigg] + \\
& + 5 W_2^0(0,2,2 \alpha) \left[G_2^0(0,2 \beta) \left(G_2^0(4,2 \beta) + \frac{8}{35} \right) + \right. \\
& + G_2^0(2,2 \beta) \left(G_2^0(2,2 \beta) + \frac{8}{15} \right) + \frac{16}{225} \Bigg] + \\
& + 9 W_4^0(0,2,2 \alpha) \left[G_4^0(0,2 \beta) \left(G_4^0(4,2 \beta) + \frac{16}{315} \right) + G_4^0(2,2 \beta) \right] - \\
& - 6 W_1^0(1,3,2 \alpha) \left[G_1^0(3,2 \beta) \left(G_1^0(1,2 \beta) + \frac{2}{3} \right) + \frac{2}{5} G_1^0(1,2 \beta) + \frac{4}{15} \right] - \\
& - 14 W_3^0(1,3,2 \alpha) G_3^0(1,2 \beta) \left(G_3^0(3,2 \beta) + \frac{4}{35} \right) + \\
& + \frac{3}{2} W_1^1(0,2,2 \alpha) \left[G_1^1(2,2 \beta) \left(G_1^1(0,2 \beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{15} G_1^1(0,2 \beta) + \frac{16}{45} \right] + \\
& + \frac{7}{72} W_3^1(0,2,2 \alpha) G_3^1(0,2 \beta) \left(G_3^1(2,2 \beta) + \frac{16}{35} \right) \Bigg\}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{0002}^1 = & \frac{R\pi^2}{8} \left\{ 2 [W_0^0(0,2,2\alpha) - W_0^0(0,0,2\alpha)] \right. \\
& \left| G_0^0(0,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 G_0^0(2,2\beta) + \frac{4}{3} \right| + \\
& + 10 [W_2^0(0,2,2\alpha) - W_2^0(0,0,2\alpha)] G_2^0(0,2\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right) + \\
& + 18 [W_4^0(0,2,2\alpha) - W_4^0(0,0,2\alpha)] G_4^0(0,2\beta) G_4^0(2,2\beta) + \\
& + [W_0^0(0,0,2\alpha) \left(G_0^0(0,2\beta) \left(G_0^0(4,2\beta) + \frac{2}{5} \right) + 2 G_0^0(4,2\beta) + \frac{4}{5} + \right. \\
& \left. + G_0^0(2,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{9} \right) + \\
& + 5 W_2^0(0,0,2\alpha) \left(G_2^0(0,2\beta) \left(G_2^0(4,2\beta) + \frac{8}{35} \right) + \right. \\
& \left. + G_2^0(2,2\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{8}{15} \right) + \frac{16}{225} \right) + \\
& + 9 W_4^0(0,0,2\alpha) \left(G_4^0(0,2\beta) \left(G_4^0(4,2\beta) + \frac{16}{315} \right) + G_4^0(2,2\beta) \right) - \\
& - 6 W_1^0(1,1,2\alpha) \left(G_1^0(3,2\beta) \left(G_1^0(1,2\beta) + \frac{2}{3} \right) + \frac{2}{5} G_1^0(1,2\beta) + \frac{4}{15} \right) - \\
& - 14 W_3^0(1,1,2\alpha) G_3^0(1,2\beta) \left(G_3^0(3,2\beta) + \frac{4}{35} \right) + \\
& + \frac{3}{2} W_1^1(0,0,2\alpha) \left(G_1^1(2,2\beta) \left(G_1^1(0,2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{15} G_1^1(0,2\beta) + \frac{16}{45} \right) + \\
& \left. + \frac{7}{72} W_3^1(0,0,2\alpha) G_3^1(0,2\beta) \left(G_3^1(2,2\beta) + \frac{16}{35} \right) \right\}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{0022}^1 = & \frac{R\pi^2}{8} \left\{ 2 [W_0^0(0,2,2\alpha) - W_0^0(0,0,2\alpha)] \right. \\
& \left| G_0^0(2,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{9} \right| + \\
& + 10 [W_2^0(0,2,2\alpha) - W_2^0(0,0,2\alpha)] \left[G_2^0(2,2\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{8}{15} \right) + \frac{16}{225} \right] + \\
& + 18 [W_4^0(0,2,2\alpha) - W_4^0(0,0,2\alpha)] G_4^0(2,2\beta) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2 W_0^0(0,0,2\alpha) \left[G_0^0(4,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{2}{3} \right) + \frac{2}{5} G_0^0(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right] + \\
& + 10 W_2^0(0,0,2\alpha) \left[G_2^0(4,2\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right) + \frac{8}{35} G_2^0(2,2\beta) + \frac{32}{525} \right] + \\
& + 18 W_4^0(0,0,2\alpha) G_4^0(2,2\beta) \left[G_4^0(4,2\beta) + \frac{16}{315} \right] - \\
& - 6 W_1^0(1,1,2\alpha) \left[G_1^0(3,2\beta) \left(G_1^0(3,2\beta) + \frac{4}{5} \right) + \frac{4}{25} \right] - \\
& - 14 W_3^0(1,1,2\alpha) \left[G_3^0(3,2\beta) \left(G_3^0(3,2\beta) + \frac{8}{35} \right) + \frac{16}{1225} \right] + \\
& + \frac{3}{2} W_1^1(0,0,2\alpha) \left[G_1^1(2,2\beta) \left(G_1^1(2,2\beta) + \frac{8}{15} \right) + \frac{16}{225} \right] + \\
& + \frac{7}{72} W_3^1(0,0,2\alpha) \left[G_3^1(2,2\beta) \left(G_3^1(2,2\beta) + \frac{32}{35} \right) + \frac{256}{1225} \right] \Bigg\}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{0210}^1 = \frac{R\pi^2}{8} \Bigg\{ & [W_0^0(2,2,2\alpha) + W_0^0(0,4,2\alpha) - 2W_0^0(0,2,2\alpha)] [G_0^0(1,2\beta) (G_0^0(0,2\beta) + \\
& + 2)] + 5 [W_2^0(2,2,2\alpha) + W_2^0(0,4,2\alpha) - 2W_2^0(0,2,2\alpha)] G_2^0(0,2\beta) G_2^0(1,2\beta) + \\
& + 9 [W_4^0(2,2,2\alpha) + W_4^0(0,4,2\alpha) - 2W_4^0(0,2,2\alpha)] G_4^0(0,2\beta) G_4^0(1,2\beta) + \\
& + W_0^0(0,2,2\alpha) \left[G_0^0(3,2\beta) (G_0^0(1,2\beta) + 2) + G_0^0(1,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{2}{3} \right) \right] + \\
& + 5 W_2^0(0,2,2\alpha) \left[G_2^0(3,2\beta) G_2^0(0,2\beta) + G_2^0(1,2\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right) \right] + \\
& + 9 W_4^0(0,2,2\alpha) [G_4^0(3,2\beta) G_4^0(0,2\beta) + G_4^0(1,2\beta) G_4^0(2,2\beta)] - \\
& - 6 W_1^0(1,3,2\alpha) G_1^0(2,2\beta) \left(G_1^0(1,2\beta) + \frac{2}{3} \right) - \\
& - 14 W_3^0(1,3,2\alpha) G_3^0(2,2\beta) G_3^0(1,2\beta) + \\
& + \frac{3}{2} W_1^1(0,2,2\alpha) G_1^1(1,2\beta) \left(G_1^1(0,2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \\
& + \frac{7}{72} W_3^1(0,2,2\alpha) G_3^1(1,2\beta) G_3^1(0,2\beta) \Bigg\}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_{0012}^1 = & -\frac{R\pi^2}{8} \left\{ 2 [W_0^0(0,2,2\alpha) - W_0^0(0,0,2\alpha)] G_0^0(1,2,\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{2}{3} \right) + \right. \\
& + 10 [W_2^0(0,2,2\alpha) - W_2^0(0,0,2\alpha)] G_2^0(1,2,\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right) + \\
& + 18 [W_4^0(0,2,2\alpha) - W_4^0(0,0,2\alpha)] G_4^0(1,2,\beta) G_4^0(2,2\beta) + \\
& + W_0^0(0,0,2\alpha) \left[G_0^0(3,2\beta) \left(G_0^0(2,2\beta) + \frac{2}{3} \right) + \right. \\
& + G_0^0(1,2\beta) \left(G_0^0(4,2\beta) + \frac{2}{5} \right) \Big] + \\
& + 5 W_2^0(0,0,2\alpha) \left[G_2^0(3,2\beta) \left(G_2^0(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right) + \right. \\
& + G_2^0(1,2\beta) \left(G_2^0(4,2\beta) + \frac{8}{35} \right) \Big] + 9 W_4^0(0,0,2\alpha) \left[G_4^0(3,2\beta) G_4^0(2,2\beta) + \right. \\
& + G_4^0(1,2\beta) \left(G_4^0(4,2\beta) + \frac{16}{315} \right) \Big] - \\
& - 6 W_1^0(1,1,2\alpha) G_1^0(2,2\beta) \left(G_1^0(3,2\beta) + \frac{2}{5} \right) - \\
& - 14 W_3^0(1,1,2\alpha) G_3^0(2,2\beta) \left(G_3^0(3,2\beta) + \frac{4}{35} \right) + \\
& + \frac{3}{2} W_1^1(0,0,2\alpha) G_1^1(1,2\beta) \left(G_1^1(2,2\beta) + \frac{4}{15} \right) + \\
& + \frac{7}{72} W_3^1(0,0,2\alpha) G_3^1(1,2\beta) \left(G_3^1(2,2\beta) + \frac{16}{35} \right) \Big\}.
\end{aligned}$$

$$I_{0200}^2 = 4 R^2 \pi^2 \left\{ [A_2^2(2\alpha) + A_0(2\alpha) A_4(2\alpha) - 2 A_0(2\alpha) A_2(2\alpha)] \right.$$

$$[B_0(2\beta)(B_0(2\beta) + 4) + 4] + 2 A_0(2\alpha) A_2(2\alpha)$$

$$\left. \left[B_0(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right] \right\}.$$

$$I_{1200}^2 = 4 R^2 \pi^2 \left\{ \left[A_2(2\alpha) A_3(2\alpha) + A_1(2\alpha) A_4(2\alpha) - 2 A_1(2\alpha) A_2(2\alpha) \right] \right. \\ \left. \left[B_0(2\beta) (B_0(2\beta) + 4) + 4 \right] + 2 A_1(2\alpha) A_2(2\alpha) \right. \\ \left. \left[B_0(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right] \right\}.$$

$$I_{2200}^2 = 4 R^2 \pi^2 \left\{ 2 \left[A_2(2\alpha) A_4(2\alpha) - A_2^2(2\alpha) \right] \left[B_0(2\beta) (B_0(2\beta) + 4) + \right. \right. \\ \left. \left. + 2 A_2^2(2\alpha) \left[B_0(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right] \right] \right\}.$$

$$I_{1002}^2 = 4 R^2 \pi^2 \left\{ \left[A_0(2\alpha) A_3(2\alpha) + A_1(2\alpha) A_2(2\alpha) - 2 A_0(2\alpha) A_1(2\alpha) \right] \right. \\ \left[B_0(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right] + \\ + A_0(2\alpha) A_1(2\alpha) \left[B_2(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \right. \\ \left. \left. + B_0(2\beta) \left(B_4(2\beta) + \frac{2}{5} \right) + 2 B_4(2\beta) + \frac{56}{45} \right] \right\}.$$

$$I_{0220}^2 = 4 R^2 \pi^2 \left\{ \left[A_2^2(2\alpha) + A_0(2\alpha) A_4(2\alpha) - 2 A_0(2\alpha) A_2(2\alpha) \right] \right. \\ \left[B_0(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right] + \\ + A_0(2\alpha) A_2(2\alpha) \left[B_2(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \right. \\ \left. \left. + B_0(2\beta) \left(B_4(2\beta) + \frac{2}{5} \right) + 2 B_4(2\beta) + \frac{56}{45} \right] \right\}.$$

$$I_{0002}^2 = 4 R^2 \pi^2 \left\{ 2 \left[A_0(2\alpha) A_2(2\alpha) - A_0^2(2\alpha) \right] \right. \\ \left[B_0(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) + 2 B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right] + \\ + A_0^2(2\alpha) \left[B_2(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \right.$$

$$+ B_0(2\beta) \left(B_4(2\beta) + \frac{2}{5} \right) + 2 B_4(2\beta) + \frac{56}{45} \left| \right|.$$

$$I_{0022}^2 = 4 R^2 \pi^2 \left\{ 2 [A_0(2\alpha) A_2(2\alpha) - A_0^2(2\alpha)] \right. \\ \left. \left| B_2(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{4}{3} \right) + \frac{4}{9} \right| + \right. \\ \left. + 2 A_0^2(2\alpha) \left| B_4(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) + \frac{2}{5} B_2(2\beta) + \frac{4}{15} \right| \right\}.$$

$$J_{0210}^2 = -4 R^2 \pi^2 \left\{ [A_2^2(2\alpha) + A_0(2\alpha) A_4(2\alpha) - 2 A_0(2\alpha) A_2(2\alpha)] \right. \\ \left. B_1(2\beta) (B_0(2\beta) + 2) + A_0(2\alpha) A_2(2\alpha) \left| B_3(2\beta) (B_6(2\beta) + 2) + \right. \right. \\ \left. \left. + B_1(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) \right| \right\}.$$

$$J_{0012}^2 = -4 R^2 \pi^2 \left\{ 2 [A_0(2\alpha) A_2(2\alpha) - A_0^2(2\alpha)] B_1(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) + \right. \\ \left. + A_0^2(2\alpha) \left| B_3(2\beta) \left(B_2(2\beta) + \frac{2}{3} \right) + B_1(2\beta) \left(B_4(2\beta) + \frac{2}{5} \right) \right| \right\}.$$

LITERATUR

1. P. GOMBÁS, Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, Verlag Birkhäuser, Basel, 1950.
2. H. M. JAMES und A. S. COOLIDGE, Phys. Rev., **51**, 860, 1937.
3. C. A. COULSON, Valence, Clarendon Press, Oxford, 1952.
4. S. WEINBAUM, Thesis, California Institute of Technology, 1933.
5. J. W. SCHERR, J. Chem. Phys., **22**, 149, 1954.
6. L. PAULING und E. B. WILSON, Introduction to Quantum Mechanics, Mc Graw-Hill Book Comp. Inc., New-York and London, 1935.
7. S. C. WANG, Phys. Rev., **31**, 579, 1928.
8. S. WEINBAUM, J. Chem. Phys., **1**, 593, 1933.
9. N. ROSEN, Phys. Rev., **38**, 2099, 1931.
10. E. F. GURNEE und J. L. MAGEE, J. Chem. Phys., **18**, 142, 1950.
11. J. O. HIRSCHFELDER und J. W. LINNET, J. Chem. Phys., **18**, 130, 1950.
12. B. KOCKEL, Ann. Phys., **15**, 64, 1954.
13. R. PAUNCZ, Acta Phys. Hung., **4**, 237, 1954.
14. A. A. FROST und J. BRAUNSTEIN, J. Chem. Phys., **19**, 1133, 1951.
15. F. BERENCZ, Acta Phys. Hung., **4**, 149, 1954.
16. H. M. JAMES und A. S. COOLIDGE, J. Chem. Phys., **1**, 825, 1933.
17. F. BERENCZ, Acta Phys. Hung., **6**, 149, 1956.
18. F. NEUMANN, Vorlesungen über die Theorie des Potentials und der Kugelfunktionen, Teubner, Leipzig, 1887.
19. M. KOTANI, A. AMEMIYA und T. SIMOSE, Proc. Phys. Math. Soc. Japan, **20**, extra No 1, 1938 22, extra No, 1940.

РАСЧЕТ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА
МЕТОДОМ ВАРИАЦИИ

Ф. БЕРЕНЦ

Резюме

В работе произведен расчет методом вариации относительно энергии связи основного состояния молекулы водорода при помощи такой общей собственной функции, которая получается из приближенной собственной функции Гунд Мулликена, примененной Хейндбаум, таким путем, что в ней эффективное порядковое число заменяется двумя вариационными параметрами.

Расчеты проводились двумя способами: с одной стороны, с помощью собственной функции, не содержащей корреляционного фактора, с другой стороны, с помощью собственной функции с корреляционным фактором.

Результат, полученный последним способом, отличается от эмпирического значения на 10,3 процентов.

Собственная функция сравнительно проста, т. к. содержит только немного вариационных параметров, итак можно ее применять для определения энергии диссоциации сложных молекул.

ÜBER DIE MIT HILFE DES STATISTISCHEN KERNMODELLS BERECHNETE PROTONENDICHTE

I. TEIL

DIE BESTIMMUNG DER ENERGIETERME DER MESONATOME

Von

D. KISDI

FORSCHUNGSGRUPPE FÜR THEORETISCHE PHYSIK DER UNGARISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN,
BUDAPEST

(Vorgelegt von P. Gombás. — Eingegangen: 28. IV. 1956)

In der vorliegenden Arbeit wurde die dem Übergang $1S \rightarrow 2P$ des Mesonatoms entsprechende Anregungsenergie bestimmt, wobei die berechneten Nukleonendichten der statistischen Kernmodelle als Grundlage dienten. Die Berechnungen wurden für die Kerne von Ti, Cu, Sb und Pb durchgeführt und ergaben für die Anregungsenergie der Reihe nach die Werte von 0,842 MeV, 1,43 MeV, 3,90 MeV und 7,75 MeV. Die entsprechenden empirischen Angaben lauten: 1,955 MeV, 1,55 MeV, 3,50 MeV und 6,02 MeV.

1. Einleitung

Es ist bekannt, dass sich Angaben über die Dichteverteilung der in den Atomkernen befindlichen Protonen durch die Untersuchung der Energieterme der Mesonate sowie durch die Streuung von schnellen Elektronen an Atomkernen gewinnen lassen.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist, auf Grund dieser beiden Methoden die mit der statistischen Theorie der Atome berechneten Verteilungen der Protonendichte mit den experimentell ermittelten Angaben zu vergleichen. Die konsequente Ausarbeitung der statistischen Theorie der Atomkerne ist mit dem Namen von GOMBÁS verknüpft [1, 2, 3]. GOMBÁS bestimmte in seinen Arbeiten die Nukleonendichten einerseits im Falle von Yukawaschen Kräften $J(r_{12}) = -g^2 \frac{e^{-r_{12}/r_0}}{r_{12}}$, andererseits in dem von singularitätsfreien Kräften $J(r_{12}) = -\varepsilon e^{-r_{12}/r_0}$ sowie $J(r_{12}) = -\varepsilon e^{-(r_{12}/r_0)^2}$. (In diesen Formeln ist r_{12} der gemessene Abstand zwischen zwei Nukleonen und r_0 die Comptonwellenlänge der π -Mesonen: $r_0 = \frac{\hbar}{M_\pi c} = 1,355 \cdot 10^{-13}$ cm. Die nachstehen-

den Erörterungen beschränken sich auf den Fall der Yukawaschen Kräfte.

Die statistische Theorie baut die Energie des Atomkernes aus folgenden Energiegliedern auf:

a) Aus der Fermischen kinetischen Energie des Nukleonengases. Es ist bekannt, dass diese Energie eine Folge des Pauliprinzips ist; die Fermische Energie verhindert, dass der Kern infolge der Wirkung der Kernkräfte zusammenbricht.

b) Aus der aus den Kernkräften resultierenden Austauschwechselwirkungsenergie. Es ist im wesentlichen diese Energie, die den Kern zusammenhält.

c) Aus der Weizsäckerschen Korrektur der kinetischen Energie. Dieses Energieglied wird unendlich, wenn die Nukleonendichte keine stetige Funktion des Ortes ist [4]. So macht z. B. diese Energie das Kernmodell mit konstanter Dichte instabil.

d) Schliesslich aus der elektrostatischen Energie, die aus der Coulombschen Wechselwirkung zwischen den einzelnen Protonen herrührt, und aus der der Coulombschen Wechselwirkung entsprechenden Austauschenergie.

Zieht man unter den Kernenergien nur die zwei wesentlichsten, nämlich die Fermische kinetische Energie und die von den Kernkräften herrührende Wechselwirkungsenergie in Betracht, so lässt sich mit der statistischen Theorie ein Kernmodell mit konstanter Dichte ableiten. Für die Protonendichte ϱ_p und den Kernradius R ergeben sich dann folgende Werte [1]:

$$\varrho_p = 0,461 \frac{1}{r_0^3}, \quad R = 0,637 A^{1/3} r_0 = 0,863 \cdot 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm.} \quad (1)$$

GOMBÁS arbeitete die statistische Theorie des Atomkernes unter Berücksichtigung sämtlicher Energieglieder aus. Im Falle von Yukawaschen Kräften folgen die Nukleonendichten der Gaussischen Verteilung [1, 2]. Die Protonendichte in einem Kern mit der Ordnungszahl Z ist also:

$$\varrho_p(r) = \frac{Z a^3}{\pi^{3/2} r_0^3} e^{-a^2 \xi^2}. \quad (2)$$

Hier ist $\xi = \frac{r}{r_0}$ die vom Kernzentrum gemessene Entfernung in r_0 -Einheiten und a ein Variationsparameter, der aus dem Minimumprinzip der Energie bestimmt wird. GOMBÁS führte an Stelle des Variationsparameters a die Grösse c_0 ein

$$a = \frac{1}{2 (9\pi)^{1/6}} \left(\frac{2}{A} \right)^{1/3} c_0 = 0,361 c_0 A^{-1/3} \quad (3)$$

und erhielt aus dem Minimumprinzip der Energie einen von der Massenzahl unabhängigen konstanten Wert: $c_0 \approx 7,0$ [1].

Bei Heranziehung der Gln. (1) und (2) ergibt sich für den Kernradius R der folgende Ausdruck*:

$$R = \left(\frac{5}{2} \right)^{1/2} \frac{r_0}{a} = 4,38 \frac{r_0}{c_0} A^{1/3}. \quad (4)$$

*Der Kernradius wird folgendermassen definiert: $R^2 = \frac{5}{3} \langle r^2 \rangle = \frac{5}{3} \frac{1}{Z} \int \varrho_p r^2 dv$. Vgl. [5].

setzt man an Stelle von c_0 den von GOMBÁS ermittelten Wert 7,0 ein, so erhält man:

$$R = 0,626 A^{1/3} r_0 = 0,848 \cdot 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm.} \quad (5)$$

Im ersten Teil der vorliegenden Arbeit soll die Energie des $1S$ - und $2P$ -terms des Mesonatoms mit Hilfe der Dichten (1) und (2) berechnet werden. Die zum Vergleich herangezogenen experimentellen Angaben wurden von MITCH und RAINWATER bestimmt [6]. Die Untersuchungen über die Streuung mit schnellen Elektronen werden in dem demnächst erscheinenden zweiten Teil dieser Arbeit behandelt.

2. Die Bestimmung der Energieterme bei Gausscher Dichteverteilung

Zur Bestimmung der Energieterme des Mesonatoms ist in erster Linie das auf das Myon (μ -Meson) einwirkende elektrostatische Potential zu ermitteln. Das elektrostatische Potential des Kernes wird aus der Poissonschen Gleichung $\Delta \varphi = -4\pi e q_p$ berechnet unter der Bedingung, dass das Potential singularitätsfrei zu sein und im Unendlichen zu verschwinden hat. Im Falle der Gausschen Dichteverteilung laut Gl. (2) ergibt sich für das elektrostatische Potential

$$\varphi = \frac{Ze}{r} \Phi \left(a \frac{r}{r_0} \right) = \frac{Ze}{r_0} \frac{1}{\xi} \Phi(a\xi), \quad (6)$$

wo Φ das Gaussche Fehlerintegral bezeichnet.

Die Energieterme des Mesonatoms sollen mit Hilfe einer Variationsmethode bestimmt werden. Es ist bekannt, dass hierzu die Variationsaufgabe

$$E = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - e\varphi \right) \Psi dv = \min! \quad (7)$$

gelöst werden muss, mit der Nebenbedingung, dass ψ auf 1 normiert sowie im Falle der angeregten Energie E auf die Eigenfunktionen der niedrigen Energiezustände orthogonal zu sein hat.

In der Gl. (7) bezeichnet μ die Masse des Myons und e die Elementarladung, dass $-e\varphi$ die potentielle Energie des Myons bedeutet.

Da das Potential φ kugelsymmetrisch ist, setzt sich Ψ aus dem Produkt einer radialen Eigenfunktion und einer sphärischen Kugelfunktion wie folgt zusammen:

$$\Psi = \frac{1}{r} f(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (8)$$

Im Falle der $1S$ - und $2P$ -Terme ist $l=0$ bzw. $l=1$. Für die radiale Eigenfunktion $f(r)$ sei im Falle dieser beiden Terme folgende Variationsform gewählt

$$r_0^{1/2} f_{1S}(r) = \frac{2}{\pi^{1/4}} (Z\beta_{1S})^{3/2} \xi e^{-\frac{1}{2}(Z\beta_{1S})^2 \xi^2}, \quad (9)$$

$$r_0^{1/2} f_{2P}(r) = \frac{4}{\sqrt{6} \pi^{1/4}} (Z\beta_{2P})^{3/2} \xi^2 e^{-\frac{1}{2}(Z\beta_{2P})^2 \xi^2}. \quad (10)$$

Diese Ausdrücke befriedigen die Randbedingungen $f(0) = f(\infty) = 0$ und sind bei jedem Wert der Variationsparameter β auf 1 normiert. Da Y_0 und Y_{1m} orthogonal aufeinander sind, braucht f_{2P} nicht orthogonal auf f_{1S} zu sein, so dass β_{1S} und β_{2P} unabhängig voneinander variiert werden können.

Setzt man die Gln. (8), (9) und (10) in den Ausdruck (7) ein, so gelangt man zu der Energie der $1S$ - und $2P$ -Terme als Funktion der entsprechenden Variationsparameter. Im Falle des Potentials (6) ergeben sich folgende Beziehungen:

$$E_{1S} = Z^2 \left\{ 148\beta_{1S}^2 - 1,20 \frac{\beta_{1S}}{\sqrt{1 + \alpha^2 \beta_{1S}^2}} \right\} \text{ MeV}, \quad (11)$$

$$E_{2P} = Z^2 \left\{ 247\beta_{2P}^2 - 0,799 \frac{\beta_{2P}}{\sqrt{1 + \alpha^2 \beta_{2P}^2}} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 \beta_{2P}^2}{1 + \alpha^2 \beta_{2P}^2} \right) \right\} \text{ MeV}. \quad (12)$$

In diesen Beziehungen ist

$$\alpha = \frac{Z}{a} = \frac{2,77}{c_0} Z A^{1/3} \quad (13)$$

eine für den Atomkern charakteristische Grösse, die im Falle $c_0 = 7,0$ wie folgt geschrieben werden kann:

$$\alpha = 0,396 Z A^{1/3}. \quad (14)$$

In die Beziehungen (11) und (12) wurden ferner die folgenden numerischen Werte eingesetzt:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} = 98,88 \text{ MeV}, \quad \frac{e^2}{r_0} = 1,063 \text{ MeV}. \quad (15)$$

In den Gln. (11) und (12) sind die Parameter β so zu wählen, dass die Energie minimal ist. Der Wert des Minimums gibt die Energie des betreffenden Terms. Auf diese Weise wurde die Energie der $1S$ - und $2P$ -Terme für die Kerne mit den Ordnungszahlen $Z = 22$, $Z = 29$, $Z = 51$ und $Z = 82$ bestimmt. Die

ergebnisse sind in der Tabelle I zusammengestellt. Die erste Spalte der Tabelle enthält die Ordnungszahl, die zweite das chemische Atomgewicht. In der dritten Spalte stehen die aus der Formel (14) berechneten Werte für α . Die vierte und fünfte Spalte gibt die Energie der 1S- bzw. 2P-Terme in MeV an, während die sechste und siebente Spalte die entsprechenden Variationsparameter enthält. Die achte Spalte zeigt die Werte der Anregungsenergie $\Delta E = E_{2p} - E_{1s}$ und die letzte die Messergebnisse von FITCH und RAINWATER.

Tabelle I
 Energie in MeV

Z	A	α	E_{1s}	β_{1s}	E_{2p}	β_{2p}	$\Delta E = E_{2p} - E_{1s}$	$\Delta E(emp)$
22	47,90	31,6	— 1,155	$3,95 \cdot 10^{-3}$	— 0,313	$1,63 \cdot 10^{-3}$	0,842	0,955
29	63,57	45,8	— 1,976	$3,86 \cdot 10^{-3}$	— 0,544	$1,62 \cdot 10^{-3}$	1,432	1,55
51	121,76	100	— 5,58	$3,43 \cdot 10^{-3}$	— 1,68	$1,62 \cdot 10^{-3}$	3,90	3,50
82	207,21	192	— 12,07	$2,78 \cdot 10^{-3}$	— 4,32	$1,60 \cdot 10^{-3}$	7,75	6,02

Die Übereinstimmung zwischen der berechneten Anregungsenergie ΔE und der empirisch gemessenen ist *größenordnungsgemäss als sehr gut anzusehen*. Die bestehenden Abweichungen lassen sich auf drei Ursachen zurückführen:

a) Die Energieterme wurden hier in der ersten Näherung der Variationsmethode bestimmt. Es ist indessen vorstellbar, dass die Variationsformen (9) und (10) die wirkliche Eigenfunktion nicht am besten approximieren, so dass für die Energieterme etwas höhere Werte erhalten wurden als sich bei der exakten Lösung ergeben hätten. Infolge des so begangenen Fehlers entsprechen also die in der Tabelle I angegebenen Anregungsenergien ΔE nicht unbedingt den exakten Lösungen des Eigenwertproblems.

b) der Energieausdruck (7) besitzt nur in nichtrelativistischer Näherung Gültigkeit. Es ist deshalb zu untersuchen, ob die relativistischen Effekte einen wesentlichen Einfluss auf die Werte der Energieterme ausüben.

c) Der Fehler kann auch davon herrühren, dass die als Grundlage genommene Gauss'sche Dichte nicht völlig der Wirklichkeit entspricht. Um die Abhängigkeit der Anregungsenergien ΔE von der Form der Dichte zu ermitteln, sollen die Energieterme auch mit der konstanten Dichte der Gl. (1) berechnet werden. Schliesslich sei untersucht, inwieweit die Energieterme vom Kernradius, genauer von der Konstante c_0 abhängen [vgl. Gl. (4)]. Es ist nämlich möglich, dass die Anregungsenergien, wenn man c_0 nicht durch den von GOMBÁS berechneten, sondern durch einen passend gewählten anderen Wert substituiert, selbst im Falle der Gauss'schen Dichteverteilung mit den empirischen Werten übereinstimmen werden.

3. Die Abschätzung des durch das Variationsverfahren verursachten Fehlers

Die Variationsformen (9) und (10) entsprechen den exakten Lösungen des sphärischen Oszillators. Wenn also auf das Mesonatom ein Oszillatorpotential einwirkt, gelangt man mit dem Variationsverfahren zu der exakten Lösung des Eigenwertproblems. In Abb. 1 ist die potentielle Energie — ep des Myons

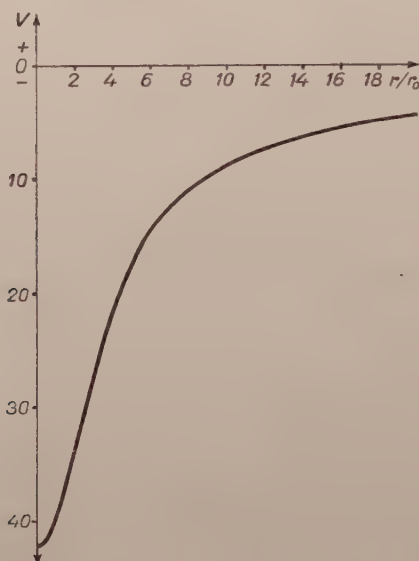


Fig. 1. Die potentielle Energie des im Feld des Pb-Kernes sich bewegenden Myons in MeV-Einheiten

bei einer Ordnungszahl $Z = 82$ dargestellt. Es ist ersichtlich, dass das Potential im Inneren des Kernes tatsächlich durch ein Oszillatorpotential [also durch eine Funktion von der Form $\varphi = \varphi_0 (1 + \delta \xi^2)$] gut angenähert werden kann. Wenn sich das Myon mit grosser Wahrscheinlichkeit im Inneren des Kernes befindet, gibt das Variationsverfahren eine gute Näherung der exakten Lösung. Dies ist bei den schweren Kernen der Fall ($Z = 51$, $Z = 82$). So ist z. B. beim Kern mit der Ordnungszahl $Z = 82$ im $1S$ -Zustand die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_{1S}(0)|^2$ im Kernzentrum fünfmal grösser als die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_{1S}(R)|^2$ am Rande des Kernes. Demgegenüber ist das Myon bei den leichteren Kernen mit grösserer Wahrscheinlichkeit auch ausserhalb des Kernes anzutreffen. So ist z. B. bei einer Ordnungszahl $Z = 22$ die Wahrscheinlichkeit $|\psi_{1S}(0)|^2$ nur um 15% grösser als die Wahrscheinlichkeit $|\psi_{1S}(R)|^2$.

Im Falle von schweren Kernen wird also der infolge des Variationsverfahrens begangene Fehler geringfügig sein. Zur Abschätzung der Grössenordnung des Fehlers wurde von uns für den Fall der Ordnungszahl $Z = 82$ die auf die

radiale Eigenfunktion $f(r)$ bezügliche Eigenwertgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \left(\frac{d^2 f}{d\xi^2} - \frac{l(l+1)}{\xi^2} f \right) - \frac{Ze^2}{r_0} \frac{1}{\xi} \Phi(a\xi) f = Ef \quad (16)$$

streng (mit der Adams-Störmerschen Methode in $\xi = 0,05$ Schritten) gelöst. Hierbei wurden für die Energie der $1S$ - und $2P$ -Terme die Werte $E_{1S} = -12,54$ MeV bzw. $E_{2P} = -4,70$ MeV gewonnen. Die mit der strengen Methode berechnete Anregungsenergie beträgt also $\Delta E = 7,84$ MeV; von diesem Wert weicht die mit dem Variationsverfahren bestimmte Anregungsenergie $\Delta E = 7,75$ MeV insgesamt um nur 1% ab. Die Abweichung von 23% von dem empirischen Wert von 6,02 MeV lässt sich also keineswegs mit dem durch das Variationsverfahren verursachten Fehler erklären.

Zusammenfassend kann man feststellen, dass der durch das Variationsverfahren verursachte Fehler bei schweren Kernen nur 1% der Anregungsenergie beträgt; hier ist die Ursache für die Abweichung vom empirischen Wert in den im 2. Abschnitt unter b) und c) angegebenen Fehlerquellen zu suchen. Demgegenüber kann das Variationsverfahren bei leichten Kernen einen bedeutenderen Fehler in der Berechnung der Anregungsenergie verursachen. Aus diesem Grunde seien die nachfolgenden Erörterungen lediglich auf den Fall von schweren Kernen beschränkt.

4. Die relativistische Korrektur

Der Energieausdruck (7) entspricht dem nichtrelativistischen Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - e\varphi. \quad (17)$$

Die relativistische Quantenmechanik ergänzt den Hamiltonoperator durch zwei Glieder. Die Korrektur der kinetischen Energie entspricht dem Massen-zuwachs, während die Korrektur der potentiellen Energie die Spin-Bahn-Wechselwirkung darstellt. In der relativistischen Theorie ist also die Gl. (17) durch folgenden Ausdruck zu ersetzen [7]:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{p^4}{8\mu^3 c^2} - e\varphi + \frac{e\hbar^2}{4\mu^2 c^2} \frac{d\varphi}{dr} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{k+1}{r} \right). \quad (18)$$

Hier bedeutet k eine Quantenzahl, deren Wert bei den Termen $S_{1/2}$, $P_{3/2}$ und $P_{1/2}$ der Reihe nach $k = -1$, $k = -2$ bzw. $k = +1$. Der Energieausdruck $E^{(rel)} = \int \psi^* H \psi^* dv$ sei auf Grund der Gl. (18) berechnet, wogegen für die

radiale Eigenfunktion die Form (9) bzw. (10) beibehalten werden soll. Der Energieausdruck für $E^{(rel)}$ ergibt sich offenbar aus der Addition des nichtrelativistischen Energieausdruckes für E und des wellenmechanischen Mittelwertes $E^{(k)}$ der Korrektionsglieder.

Da der Übergang $2P_{1/2} \rightarrow 1S_{1/2}$ verboten ist, entspricht jetzt dem nichtrelativistischen Übergang $2P \rightarrow 1S$ der Übergang $2P_{3/2} \rightarrow S_{1/2}$. Für die Korrektionsenergie $E^{(k)}$ ergeben sich im Falle der $1S_{1/2}$ - und $2P_{2/3}$ -Terme die folgenden Ausdrücke:

$$E_{1S_{1/2}}^{(k)} = -0,460 Z^2 \beta_{1S}^2 \left\{ \frac{3}{2} \frac{E_{1S}}{Z^2} + 1,20 \frac{\beta_{1S}}{\sqrt{1 + \alpha^2 \beta_{1S}^2}} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 \beta_{1S}^2}{1 + \alpha^2 \beta_{1S}^2} \right] \text{MeV} \right\}, \quad (19)$$

$$E_{2P_{3/2}}^{(k)} = -0,460 Z^2 \beta_{2P}^2 \left\{ \frac{5}{2} \frac{E_{2P}}{Z^2} + 0,799 \frac{\beta_{2P}}{\sqrt{1 + \alpha^2 \beta_{2P}^2}} \left[2 + \frac{\alpha^2 \beta_{2P}^2}{1 + \alpha^2 \beta_{2P}^2} + \frac{3}{4} \left(\frac{\alpha^2 \beta_{2P}^2}{1 + \alpha^2 \beta_{2P}^2} \right)^2 \right] \text{MeV} \right\}. \quad (20)$$

Hier bezeichnen die auf der rechten Seite stehenden Grössen E_{1S} und E_{2P} die nichtrelativistischen Energien. Der weitere Gang der Berechnung wäre, die Energieausdrücke

$$E^{(rel)} = E + E^{(k)}$$

n bezug auf β zu minimalisieren, wonach der Minimumwert der Energie die Energieeigenwerte geben würde. Anstatt dessen soll hier die erste Näherung der Störungsrechnung angewandt werden, und zwar folgenderweise: für β_{1S} und β_{2P} werden die im nichtrelativistischen Fall bestimmten Werte übernommen. Mit Hilfe dieser erhält man dann aus den Gln. (19) und (20) die Werte der Korrektionsenergien $E^{(k)}$. Die Ergebnisse der für den Fall der Ordnungszahlen $Z=51$ und $Z=82$ durchgeführten Berechnungen sind in der Tabelle II zusammengefasst. In der Tabelle wurden zu Vergleichszwecken nochmals die nichtrelativistischen sowie die empirischen Anregungsenergien angegeben.

Tabelle II
Energie in MeV

Z	$E_{1S_{1/2}}^{(rel)}$	$E_{2P_{3/2}}^{(rel)}$	$\Delta E^{(rel)}$	ΔE	$\Delta E^{(emp)}$
51	— 5,61	— 1,69	3,92	3,90	3,50
82	— 12,11	— 4,37	7,74	7,75	6,02

Die Abweichung der relativistischen Anregungsenergie $\Delta E^{(rel)}$ von der nichtrelativistischen Anregungsenergie ΔE ist ganz unbedeutend. Im End-
 ergebnis dürfte also die Ursache für die Differenz zwischen den berechneten und
 gemessenen Anregungsenergiwerten bei schweren Kernen darin bestehen, dass
 die mit der statistischen Theorie berechnete Protonendichte nicht völlig der
 Wirklichkeit entspricht.

5. Das Kernmodell mit konstanter Dichte

Im bisherigen wurde gezeigt, dass es nicht möglich ist, die Anregungsenergie
 der Mesonatomie der schweren Kerne bei Annahme einer Protonendichte mit
 Gausscher Verteilung in voller Übereinstimmung mit der Erfahrung zu deuten.
 Im vorliegenden Abschnitt sei nunmehr untersucht, inwieweit sich die Anre-
 gungsenergien ändern, wenn man im Kern eine konstante Dichte annimmt.
 Im Falle konstanter Dichte ergibt sich das elektrostatische Potential zu:

$$\varphi = \begin{cases} \frac{Ze}{R} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right), & r \leq R, \\ \frac{Ze}{r}, & r \geq R. \end{cases} \quad (21)$$

Hier ist R der Kernradius, der in diesem Abschnitt als gleich gross wie in Gl.
 (1) angenommen werden soll.

Berechnet man die Energie der 1S- und 2P-Terme mit diesem Potential
 (wobei die bisher benutzten Variationsformen beibehalten seien), so gelangt
 man zu folgenden Ausdrücken:

$$E_{1S} = Z^2 \left\{ 148 \left(\frac{r_0}{ZR} \right)^2 \lambda_{1S}^2 - 9,00 \frac{r_0}{ZR} \left[\sqrt{\pi} \Phi(\lambda_{1S}) \left(1 - \frac{1}{2\lambda_{1S}} \right) + \frac{1}{\lambda_{1S}} e^{-\lambda_{1S}^2} \right] \right\} \text{MeV}, \quad (22)$$

$$E_{2P} = Z^2 \left\{ 247 \left(\frac{r_0}{ZR} \right)^2 \lambda_{2P}^2 - 9,00 \frac{r_0}{ZR} \left[\sqrt{\pi} \Phi(\lambda_{2P}) \left(1 - \frac{5}{6\lambda_{2P}} \right) + \frac{5}{3\lambda_{2P}} e^{-\lambda_{2P}^2} \right] \right\} \text{MeV}. \quad (23)$$

In diesen Gleichungen bedeutet λ einen Variationsparameter, der mit der
 früher eingeführten Grösse β in folgender Beziehung steht:

$$\lambda = \frac{ZR}{r_0} \beta = 0,637 ZA^{1/3} \beta. \quad (24)$$

Die Werte der die Energien (22) und (23) minimalisierenden Parameter λ , die diesen entsprechenden Werte von β sowie die Energien E sind in der Tabelle III zusammengestellt.

Tabelle III
Energien in MeV

Z	λ_{1S}	β_{1S}	E_{1S}	λ_{2P}	β_{2P}	E_{2P}
51	0,523	$3,25 \cdot 10^{-3}$	— 5,60	0,245	$1,52 \cdot 10^{-3}$	— 1,68
82	0,799	$2,58 \cdot 10^{-3}$	— 12,21	0,457	$1,48 \cdot 10^{-3}$	— 4,33

Schliesslich werden in der Tabelle IV die mit der konstanten und der Gaussischen Dichteverteilung gewonnenen Anregungsenergien mit den empirischen Werten verglichen. Die Abweichung vom empirischen Wert ist um eine Grössenordnung grösser als die Differenz der mit den zweierlei Dichten berechneten Anregungsenergien. Aus diesen Berechnungen darf also gefolgert werden, dass die Änderung der Dichteform die Anregungsenergien nicht wesentlich beeinflusst; die Ursache für die Abweichung zwischen den berechneten und den gemessenen Werten ist in einem anderen Umstand zu suchen.

Tabelle IV
Energien in MeV

Z	ΔE Konstante Dichte	ΔE Gaussische Verteilung	ΔE Empirisch
51	3,92	3,90	3,50
82	7,88	7,75	6,02

6. Die Bestimmung des Kernradius

Im vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, dass die Anregungsenergie des Mesonatoms nur unwesentlich von der Form der Dichteverteilung der im Kern befindlichen Protonen abhängt. Jetzt sei untersucht, inwiefern die Anregungsenergie durch den Kernradius beeinflusst wird. Als Grundlage sei das eine Gaussische Verteilung voraussetzende Modell gewählt; im Falle dieses Modells ist die Energie der 1S- und 2P-Terme durch die Gln. (11) und (12) gegeben. Im Abschnitt 2 wurde α aus der Gl. (14) berechnet, d. h. die Konstante c_0 durch den von GOMBÁS ermittelten Wert von 7,0 substituiert. Jetzt soll jener Wert von c_0 bestimmt werden, bei dem die Anregungsenergie der Mesonate mit grosser Ordnungszahl die bestmögliche Übereinstimmung mit den empirischen Angaben aufweist.

Aus den Gln. (11) und (12) geht hervor, dass die durch Z^2 dividierten Energiewerte ausschliesslich von der Grösse a abhängen. Infolgedessen ist der durch Z^2 dividierte Wert der Anregungsenergie $\Delta E = E_{2P} - E_{1S}$ ebenfalls nur eine Funktion der Grösse a :

$$\frac{\Delta E}{Z^2} = F(a). \quad (25)$$

Die den in der 3. Spalte der Tabelle I angegebenen Werten von a entsprechenden Werte F kann man derweise erhalten, dass man die in der 8. Spalte befindlichen Anregungsenergien der Reihe nach durch das Quadrat der entsprechenden Ordnungszahlen dividiert. Auf diese Weise lassen sich vier Punkte der Funktion $F(a)$ bestimmen. Schon aus diesen vier Punkten ist ersichtlich, dass die Funktion $F(a)$ in guter Näherung durch eine Funktion zweiten Grades (Parabel) approximiert werden kann:

$$F(a) = b_0 a^2 + b_1 a + b_2, \quad (26)$$

wo

$$b_0 = 2,39 \cdot 10^{-9} \text{ MeV}; \quad b_1 = -4,25 \cdot 10^{-6} \text{ MeV}; \quad b_2 = 1,89 \cdot 10^{-3} \text{ MeV}.$$

Für die Anregungsenergie ergibt sich aus den Gln. (25) und (26) die Formel $\Delta E = Z^2 (b_0 a^2 + b_1 a + b_2)$ aus der sich durch Einsetzen der Gl. (13) folgender Ausdruck gewinnen lässt:

$$\Delta E = Z^2 \left\{ 1,84 \cdot 10^{-8} \left(\frac{ZA^{1/2}}{c_0} \right) - 1,18 \cdot 10^{-5} \frac{ZA^{1/3}}{c_0} + 1,89 \cdot 10^{-3} \right\} \text{ MeV}. \quad (27)$$

Schliesslich soll c_0 in der Gl. (27) so gewählt werden, dass ΔE im Falle schwerer Kerne gut mit den empirischen Werten übereinstimmt. Es ist un-
schwer zu beweisen, dass diese Forderung durch den folgenden Wert für c_0 erfüllt wird.

$$c_0 = 5,1. \quad (28)$$

Setzt man diesen Wert von c_0 in die Gl. (4) ein, so erhält man jenen Kernradius, der gemäss dem Spektrum des Mesonatoms am besten der Wirklichkeit entspricht:

$$R = 0,862 r_0 A^{1/3} = 1,17 \cdot 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm}. \quad (29)$$

7. Diskussion der Ergebnisse

Die Ergebnisse der hier besprochenen Untersuchungen lassen sich also wie folgt zusammenfassen. Das statistische Kernmodell ist imstande, das Spektrum des Mesonatoms in richtiger Grössenordnung zu deuten. Die Ursache für die Abweichung zwischen den berechneten und gemessenen Werten besteht darin, dass der auf Grund der statistischen Theorie berechnete Kernradius

$R = 0,848 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$ cm beträgt (vgl. [6]), also um etwa 25% kleiner als der empirischen Angaben am besten entsprechende Wert $R = 1,17 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$ cm. Diese Abweichung ist indessen nicht als ein grosser Fehler anzusprechen, besonders nicht, wenn man berücksichtigt, dass die Kernradiusberechnung auf statistischen Theorie keine einzige empirische Angabe verwendet.

Die Ursache dafür, dass die berechneten Kernradien nicht völlig mit den empirischen Werten übereinstimmen, dürfte in den Kernkräften zu suchen sein. Es ist offenkundig, dass die Kernradien, wenn man das Yukawasche Potential durch eine singularitätsfreie Kernkraft oder gerade im Falle $r_{12} = 0$ durch eine Kraft ersetzt, die in eine abstossende Singularität übergeht, grössere Werte haben werden.

Für die Anregungsenergie des Mesonatoms sind besonders dann gute Ergebnisse zu erwarten, wenn man die Protonendichte für den Fall von Kernkräften vom Typ $J(r_{12}) = -\varepsilon e^{-(r_{12}/r_0)^2}$ berechnet; in diesem Fall ergibt sich nämlich der Kernradius zu $R = 1,10 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$ cm [3]. In der vorliegenden Arbeit wurden aber trotzdem die Yukawaschen Kräfte als Grundlage gewählt, weil die Mesonentheorie der Kernkräfte eindeutig zu dieser Wechselwirkung führt, während die Einführung der singularitätsfreien Kernkräfte nur auf phänomenologische Weise möglich ist.

* * *

An dieser Stelle sei Herrn Prof. Dr. P. GOMBÁS für seine wertvollen Ratschläge und seine Unterstützung bestens gedankt. Zu Dank verpflichtet ist der Verfasser ferner seinen Mitarbeiterinnen Fr. E. MÁGORI und Fr. Zs. OZORÓCZY, die bei der Ausführung der numerischen Berechnungen behilflich waren.

LITERATUR

1. P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **1**, 329, 1952.
2. P. GOMBÁS, Acta Phys. Hung., **2**, 223, 1952.
3. P. GOMBÁS, E. MÁGORI, B. MOLNÁR und É. SZABÓ, Acta Phys. Hung., **4**, 267, 1954.
4. C. F. v. WEIZSÄCKER, ZS. f. Phys., **96**, 431, 1935; vgl. noch P. GOMBÁS, Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Springer, Wien, 1949. S. 110 ff.
7. B. G. JANOVICI, Phys. Rev., **95**, 389, 1954.
5. V. L. FITCH und J. RAINWATER, Phys. Rev., **92**, 789, 1953.
6. L. I. SCHIFF, Quantum Mechanics, McGraw-Hill Book Company, Inc. New York, 1948. S. 320.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТОННОЙ ПЛОТНОСТИ, ВЫЧИСЛЕННОЙ С ПОМОЩЬЮ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЯДРА I. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ μ -МЕЗОННОГО АТОМА

Д. КИШДИ

Резюме

В работе определена энергия возбуждения, соответствующая переходу $1S \rightarrow 2P$ μ -мезонного атома. На основе нуклонной плотности, вычисленной при помощи статистической модели ядра. Расчеты проведены в случае ядер Ti, Cu, Sb и Pb; на энергии возбуждения получены следующие значения: 0,842 MeV, 1,43 MeV, 3,90 MeV, 7,75 MeV соответственно. Соответствующие экспериментальные данные: 0,955 MeV, 1,55 MeV, 3,50 MeV, и 6,02 MeV.

ON THE PHOTON COMPONENT OF EXTENSIVE AIR SHOWERS

By

L. JÁNOSY, T. SÁNDOR and A. SOMOGYI

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE OF PHYSICS, DEPARTMENT FOR COSMIC RAYS, BUDAPEST

(Received 4. V. 1956)

Extensive air shower measurements carried out simultaneously with counter batteries of different areas are reported. All the four counter batteries were covered with absorbers of different materials and thicknesses. The spectrum of the effective density (i. e. that of the primaries capable of producing at least one ionizing secondary beneath the absorber) turns out to vary with the material and thickness of the absorber. This means that the transition effect appreciably depends on the nature of showers selected with different counter areas.

I

The ratio of electrons and photons in air showers can be determined with coincidence arrangements. Consider an n -fold coincidence arrangement consisting of n counter batteries of areas S . The probability of an n -fold coincidence caused by a shower containing in the vicinity of the apparatus x particles per unit area is given by

$$(1 - e^{-Sx})^n$$

and thus the rate of n -fold coincidences caused by all showers incident on the arrangement is

$$C_n(S) = \int_0^{\infty} (1 - e^{-Sx})^n A(x) dx, \quad (1)$$

where $A(x)$ is the differential density spectrum of the showers. It has been shown that

$$C_n(S) = c_n S^\gamma \quad (2)$$

and thus

$$A(x) = ax^{-\gamma-1}. \quad (3)$$

Measurements in our own laboratory with a fourfold arrangement, the counter batteries being arranged in the corners of a square of 9,5 m side lengths, have led to the following numerical values ([1] and further unpublished data)

$$a = 1,22 \pm 0,04, \quad [\text{units : dm, hour}]$$

$$\gamma = 1,421 \pm 0,009. \quad (4)$$

The above values are in good agreement with those found by other workers [2].

Suppose the electrons to be accompanied by photons; denote the density of photons by y . If the density of photons is proportional to that of electrons then the density z of electrons and photons can be written

$$z = x + y = (1 + \alpha)x.$$

Covering the counter batteries by a thin layer of lead, one might expect the photons to give rise to pairs of electrons; if we suppose that the electrons and photons possess energies around the critical energy in air, i. e. of the order of 10^8 eV, then one must suppose that a layer of a few mm of lead although insufficient to stop many of the electrons is sufficient for many of the photons to produce pairs. More accurately, the density $z(\theta)$ of particles, i. e. the density of the single incident electrons capable of penetrating the absorber together with the density of the pairs created in the absorber and emerging out of it should be

$$z(\theta) = x(p(\theta) + \alpha q(\theta)) = \beta x, \quad (5)$$

where $p(\theta)$ is the probability for an electron to traverse the absorber and $q(\theta)$ the probability for a photon to create a pair in the absorber, of which at least one electron emerges out of the absorber. θ is the thickness of the absorber. If for a given lead absorber $p(\theta) \sim q(\theta) \sim 1$ then

$$\beta \sim 1 + \alpha \sim 2.$$

According to the above picture a lead absorber of a few mm thickness should increase the density of particles falling upon the counters by a factor β , thus the rate of coincidences under the layer θ should be expected to be given by

$$C_n(S, \theta) = \int_0^\infty (1 - e^{-Sx\beta})^n ax^{-\gamma-1} dx = \beta^\gamma C_n(S).$$

For $\beta \sim 2$ one should expect an increase of the rate of coincidences by a factor $\beta^\gamma \sim 3$. Actual measurements by many authors [3], [4] have, however, shown that although the rate of coincidences in a shower arrangement indeed increases if the counters are covered by thin layers of lead, the increase amounts to a few percents only and this increase is not compatible with the assumption that the particle density is considerably increased by the creation of pairs in the absorber.

The comparatively small increase in the rate of shower coincidences caused by lead absorbers might be interpreted either by assuming that the electrons are accompanied only by very few photons of energies sufficient to produce

pairs or alternatively it might be accounted for by the assumption that the increase of particle density caused by the creation of pairs is nearly completely compensated by the loss of incident electrons through absorption. The latter assumption can be ruled out, however, according to the measurements of MILLAR [3] and also others [5] showing that the rate of coincidences is only little reduced by an absorber consisting of light material, where pair production is negligible but where the absorption must be expected to be comparable to that of an absorber of higher atomic number. Measurements with light absorbers show that many of the electrons incident on a shower arrangement have sufficient energy to penetrate a lead absorber of about 1 cm Pb. The lack of increase of coincidences under such an absorber seems therefore to indicate that there are only few photons accompanying the electrons, thus the measurements seem to indicate $\alpha \ll 1$.

According to the cascade theory one should expect $\alpha \sim 1$. There seems thus to be a discrepancy between the experimental results and the prediction of the theory. Measurements which we report presently seem to shed some light on the problem.

We have measured the coincidence rate recorded by a shower arrangement as a function of the area S of the counters under various layers of absorbers.

II

The experimental arrangement. The measurements were carried out at a height of 410 m above sea level inside a wooden hut, the roof of which was about 10 g/cm² water equivalent. The arrangement consisted of a fourfold coincidence set. The four counter batteries were arranged in the corners of a square of about 10 m side lengths (see Fig. 1). The batteries consisted of 10 counters each; various combinations of these counters were used so as to observe coincidences obtained with different counter areas. The counters were resting on a 5 cm thick layer of lead and were surrounded from the sides by a lead absorber 7,5 cm thick. Various absorbers resting on the side absorber were used in the course of the measurements. The counter batteries were enclosed in 4 aluminium boxes of 5,5 mm wall thickness and the absorbers placed above the arrangement were resting on a 2,5 cm thick wooden board, the board being supported by the side absorber. Measurements were also carried out with water absorbers, in a zinc plate box without lid of 0,5 mm wall thickness containing the water.

The results of the series of measurements are collected in Table 1. In Fig. 1 we have plotted the quantities

$$R = C_4(\theta)/\dot{C}_4(0)$$

Table 1

	320 cm ²		640 cm ²		1600 cm ²		3200 cm ²	
	coinc./hour	relative values	coinc./hour	relative values	coinc./hour	relative values	coinc./hour	relative values
0 m/m Pb	2,9±0,15		8,4±0,21		29,8±0,37		78,8±0,61	
3 m/m Pb	4,1±0,25	1,41±0,12	10,7±0,39	1,27±0,06	34,5±0,70	1,16±0,03	86,4±1,1	1,09±0,03
7 m/m Pb	4,7±0,16	1,62±0,1	11,1±0,24	1,32±0,04	32,9±0,41	1,10±0,02	79,4±0,61	1,01±0,03
10 m/m Pb	4,4±0,21	1,52±0,11	10,4±0,32	1,24±0,05	31,0±0,55	1,04±0,02	71,0±0,84	0,90±0,03
13 m/m Pb	4,0±0,17	1,38±0,10	9,5±0,26	1,13±0,04	28,4±0,44	0,95±0,02	67,3±0,68	0,85±0,03
25 m/m Pb	2,6±0,4	0,90±0,07	6,0±0,21	0,71±0,03	16,7±0,35	0,56±0,01	39,3±0,55	0,50±0,03
18,5 m/m Fe	3,5±0,15	1,21±0,08	8,6±0,24	1,02±0,04	27,0±0,42	0,91±0,02	66,8±0,65	0,85±0,03
187 m/m H ₂ O	2,7±0,15	0,93±0,07	6,3±0,23	0,74±0,03	20,7±0,41	0,69±0,01	51,4±0,66	0,65±0,03

i. e. the relative change of coincidence rates as function of the absorber thickness Θ , each transition curve corresponding to measurements at constant area S . We see that the relative transition effect is the more pronounced the smaller the area S of the counters.

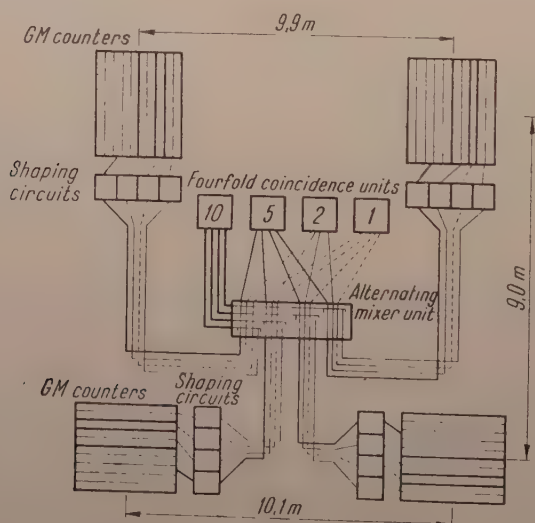


Fig. 1. The scheme of the apparatus

According to the considerations discussed in part I the transition effect should, however, be independent of S , thus our results show that the approximations made there are unsatisfactory.

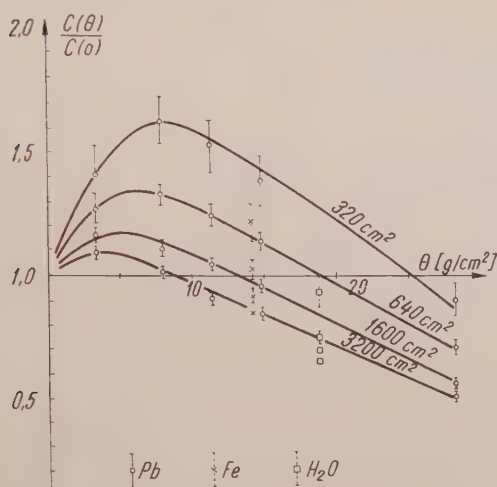


Fig. 2. The transition effects observed with different counter areas

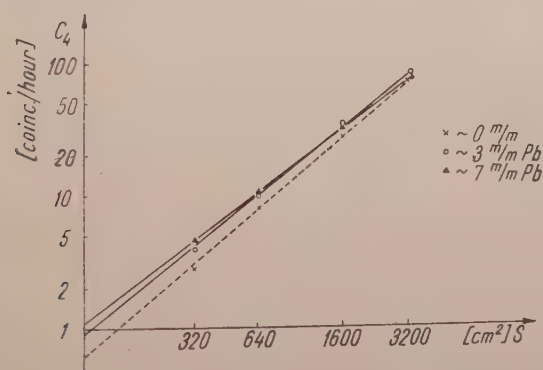


Fig. 3. The rate of fourfold coincidences versus counter areas under absorbers of different materials and thicknesses

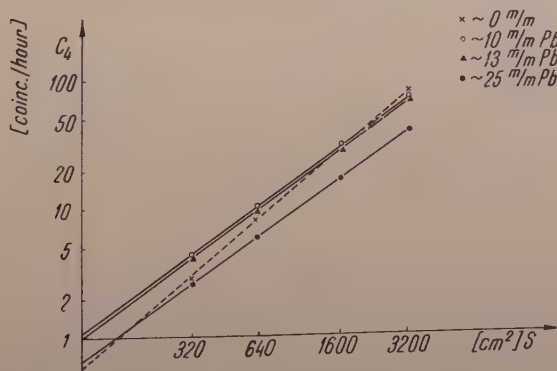


Fig. 4. The rate of fourfold coincidences versus counter areas under absorbers of different materials and thicknesses

So as to see where the discrepancies arise from, we have plotted in Figs. 3, 4 and 5 $\ln C_4(\theta)$ against $\ln S$.

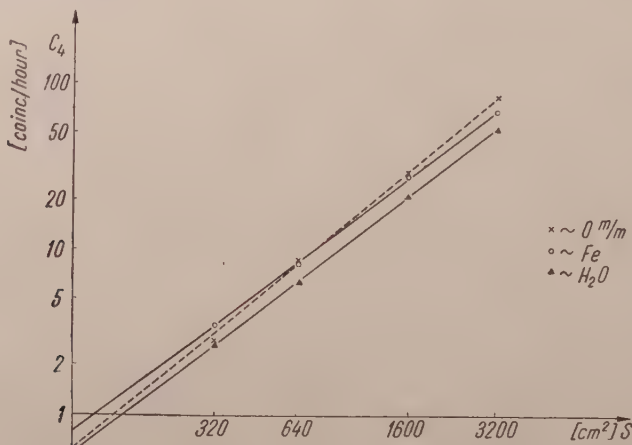


Fig. 5. The rate of fourfold coincidences versus counter areas under absorbers of different materials and thicknesses

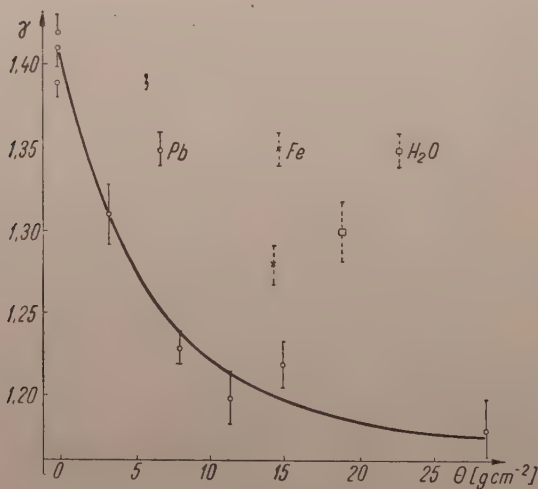


Fig. 6. The exponent of the effective-density spectrum versus the thickness of the absorber

The slope of the curves thus obtained gives the exponents of the effective density spectrum under various thicknesses of absorber. From Figs. 3, 4 and 5 we see that the lines obtained for various absorber thicknesses are not parallel, thus the exponent of the effective density spectrum depends on the thickness of absorber.

Denoting thus the effective density spectrum under an absorber Θ by

$$A_{\Theta}(x) = a(\Theta)x^{-\gamma(\Theta)-1}$$

we have collected the values of $\gamma(\Theta)$ and $a(\Theta)$ in Table 2 and plotted them in

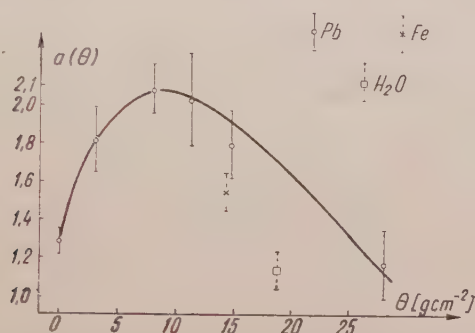


Fig. 7. The coefficient of the effective-density spectrum versus the thickness of the absorber

Figs. 6 and 7. (The shape of the function $a(\Theta)$ depends on the choice of unit of area and thus the graph of Fig. 7 contains some arbitrariness.)

Table 2

Absorber	$a(\Theta)$	$\gamma(\Theta)$
0 mm	$1,29 \pm 0,06$	$1,41 \pm 0,01$
3 mm Pb	$1,82 \pm 0,17$	$1,31 \pm 0,02$
7 mm Pb	$2,09 \pm 0,13$	$1,23 \pm 0,01$
10 mm Pb	$2,03 \pm 0,25$	$1,20 \pm 0,02$
13 mm Pb	$1,80 \pm 0,18$	$1,22 \pm 0,01$
25 mm Pb	$1,17 \pm 0,18$	$1,18 \pm 0,02$
18,5 mm Fe	$1,55 \pm 0,10$	$1,28 \pm 0,01$
187 mm H ₂ O	$1,14 \pm 0,10$	$1,30 \pm 0,02$

III

The question arises whether the observed values are seriously affected by scattering effects or not. So as to make clear this point we carried out control measurements in two different ways.

1. If the counters of different sensitive areas are being placed at different distances from the side wall (Fig. 8), the counting rates of the individual counters are possibly influenced in different ways. Therefore we carried out measurements also without a side wall. The data thus obtained are collected in Table 3, when the values measured with side wall and wooden roof are also indicated. Taking the weighted mean of the relative values, the loss caused by the side walls and wooden roof turns out to be $3,2 \pm 0,8\%$. The root mean square deviation (1,4) of the values obtained with different areas scarcely exceeds the standard error of the mean (0,8), thus the losses observed with different counter areas can be taken to be equal.

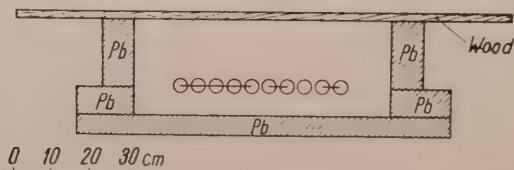


Fig. 8. The arrangement of the counters with side absorber

Nevertheless when attributing the difference between the root mean square deviation and the standard error to a weak systematic variation, this would be of just the opposite sign to the difference in the transition effects. Thus, if correction for the difference of the side wall effects would be made, the difference in the transition effects would appear yet more pronounced.

Table 3

	320 cm ²		640 cm ²		1600 cm ²		3200 cm ²	
	coinc/h	relative %	coinc/h	relative %	coinc/h	relative %	coinc/h	relative %
without side wall	3,2 ± 0,1		8,7 ± 0,2		31,1 ± 0,3		80,8 ± 0,5	
		90,6 ± 5,6		96,5 ± 3,2		95,8 ± 1,5		97,5 ± 1,0
with side wall and wooden roof	2,9 ± 0,1		8,4 ± 0,2		29,8 ± 0,4		78,8 ± 0,6	

2. The scattering in the roof absorber and the scattering backwards into the absorber beneath the counters can also cause a spurious change in the transition effect observed with different counter areas. The scattering may appear either as loss in the shower rate (Fig. 9a) or as increase of it (Fig. 9b and 9c). The change in the apparent sensitive areas when the counters, connected in parallel, are placed close together, is not proportional to the area of the

counter surfaces but the scattering alters the apparent sensitive areas in first approximation by a constant additive term.

So as to examine the effects of scattering, the following measurements were carried out. The rate of showers under 13 mm Pb was measured with the same counter batteries as before but the counters in each battery were connected as shown in Fig. 10. The counting rates obtained with 5 counters

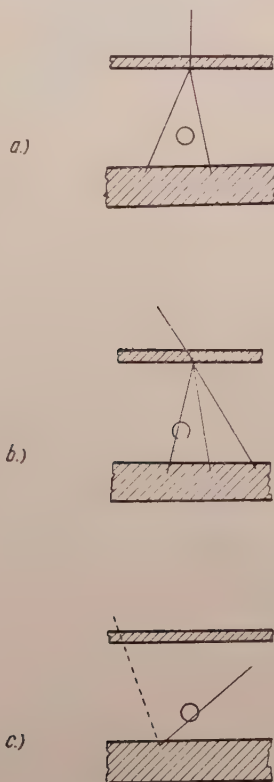


Fig. 9a, b, c. Possible scattering events. Fig. 9a: spurious diminishing of the counting rate. Fig. 9b, c: spurious increase of the counting rate

No 1, 3, 5, 7, 9), 2 counters (No 2, 8), 2 counters (No 4, 6) and -- for sake of control -- with all the 10 counters (No 1—10) are collected in Table 4. It can be seen that the counting rate observed with counters No 1, 3, 5, 7, 9 significantly exceeds that of counters No 1, 2, 3, 4, 5. This would indicate that the scattering has an appreciable effect on γ causing some spurious diminution of it.

In order to check this conclusion measurements were also made -- but without absorber over the counters -- with the arrangement shown in Fig. 10. The results are collected in Table 5. As can be seen from there, the counting rate of counters No 1, 3, 5, 7, 9 exceeds that of counters No 1, 2, 3, 4, 5 even without absorber, when the effects of scattering can be neglected.

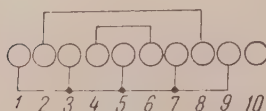


Fig. 10. The connection of the counters in order to examine the effects of scattering

Table 4
13 mm Pb 1" wood

	Normal geometry	Modified geometry		Difference
		Observed values	Normalized values	
3200 cm ² 10 counters	$C(1-10) = 67,3 \pm 0,68$	$C(1-10) = 67,1 \pm 0,47$	67,3	0
1600 cm ² 5 counters	$C(1, 2, 3, 4, 5) = 28,4 \pm 0,44$	$C(1, 3, 5, 7, 9) = 34,0 \pm 0,32$	34,1	$5,6 \pm 0,54$
640 cm ² 2 counters	$C(6, 7) = 9,5 \pm 0,26$	$C(4, 6) = 9,95 \pm 0,17$ $C(2, 8) = 11,0 \pm 0,20$	10,0 11,05	$0,5 \pm 0,31$ $1,5 \pm 0,33$

Therefore the major part of the difference in the counting rates observed under 13 mm Pb must be due to causes other than scattering. Disregarding possible effects caused by the apparatus, such an event may be caused for instance by showers with inclined axis for which the counters No 1, 3, 5, 7, 9 show a greater area than the counters No 1, 2, 3, 4, 5.

Table 5
0 mm Pb 1" wood

	Normal geometry	Modified geometry		Difference
		Observed values	Normalized values	
3200 cm ² 10 counters	$C(1-10) = 78,8 \pm 0,6$	$C(1-10) = 80,3 \pm 0,7$	78,8	0
1600 cm ² 5 counters	$C(1, 2, 3, 4, 5) = 29,8 \pm 0,4$	$C(1, 3, 5, 7, 9) = 33,4 \pm 0,4$	32,8	$3,0 \pm 0,6$
640 cm ² 2 counters	$C(6, 7) = 8,4 \pm 0,2$	$C(4, 6) = 8,7 \pm 0,2$	8,5	$0,1 \pm 0,3$

It can thus be concluded that although the influence of scattering effects cannot be excluded completely, only a small fraction of the variation of γ may be explained by them.

The results obtained will be discussed in a subsequent paper.

REFERENCES

- J. KOCH, T. SÁNDOR, A. SOMOGYI and J. SZIVEK, KFKI Közleményei (Comm. Centr. Res. Inst. Phys.) **1**, 61, 1953.
Г. Т. Зацепин, В. В. Миллер, И. Л. Розенталь и Л. Х. Эйдуc, ЖЭТФ, **17**, 1125, 1947.
P. AUGER, J. DAUDIN, A. FRÉON and R. MAZE, Compt. Rend., **226**, 168, 1948.
G. COCCONI and V. TONGIORGI, Phys. Rev., **75**, 1058, 1949.
D. D. MILLAR, Nuovo Cimento, **8**, 279, 1951.
C. MILONE, Nuovo Cimento, **11**, 241, 1954.
J. M. MASSALSKI, Bull. Ac. Pol. Sci., **2**, 335, 1954.
H. MARRETT, Phys. Rev., **84**, 339, 1951.
C. MILONE, Nuovo Cimento, **9**, 549, 1952.
C. MILONE, Phys. Rev., **87**, 680, 1952.

О ФОТОННОМ КОМПОНЕНТЕ РАСПРОСТРАНЕННЫХ ЛИВНЕЙ
КОСМИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Л. ЯНОШШИ, Т. ШАНДОР и А. ШОМОДЬИ

Резюме

Публикуются измерения распространенных воздушных ливней, совершенные одновременно несколькими счетчиками с различными по величине поверхностями. Все четыре счетчика покрывались различными по составу и по толщине абсорбентами.

Спектр эффективной плотности (т. е. плотности тех первичных частиц, которые способны создать по крайней мере одну ионизирующую вторичную частицу под данным абсорбентом) оказался зависящим от вещества и плотности абсорбента. Это значит, что переходный эффект сильно зависит от того, что какие воздушные ливни избираются различными по величине поверхностями счетчиков.



EXPERIMENTS ON THE ROSSI CURVE

By

L. JÁNOSSY and L. NAGY

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE OF PHYSICS, DEPARTMENT FOR COSMIC RAYS, BUDAPEST

(Received 31. V. 1956)

By means of an anticoincidence arrangement showers initiated by ionizing particles and photons in lead were separated. The maximum rate of showers due to photons was found at a thickness of absorber greater by $(0,6 \pm 0,09)$ cm than the absorber thickness at which the maximum rate of showers produced by ionizing particles was recorded. Through a modification of the apparatus it was made possible to separate photon, electron and μ -meson produced showers. G. M.-counters of large surface placed besides the absorber and connected in anticoincidence prevented registration when air showers of great density accompanied the particle generating the shower. The shift of the maxima between the transition curves for photons and electrons was found to be $(0,4 \pm 0,08)$ cm. For the ratio of maxima of the above two curves a value of $f/e = 0,41 \pm 0,008$ was obtained as a lower limit.

Introduction

A great number of publications have dealt with the Rossi curve, several points, however, concerning this curve have not been sufficiently confirmed by experiments. This applies especially to the separation of primaries producing the showers. Some investigators [1—8] separated showers due to photons from those due to ionizing particles, but no attempt has been made to separate simultaneously showers generated by photons, electrons and μ -mesons.

The aim of our own experiments was to supply information on just those questions not yet sufficiently clear.

As a first step showers produced by photons and ionizing particles were separated by means of an anticoincidence arrangement. After modifying the arrangement the μ -meson produced showers were separated, and finally showers due to photons, electrons and μ -mesons were measured simultaneously. The measurements were carried out in a wooden hut built for cosmic ray experiments in the Central Research Institute for Physics at a height of 400 m above sea level.

Separation of showers produced by photons and ionizing particles

Experimental arrangement

Below a lead absorber of 120×45 cm² surface five G. M.-counters were placed in the corners of a regular pentagon so that the simultaneous discharge of all the five counters required a minimum of three ionizing particles (Fig. 1,

counters B). At the top and at each side of the absorber counters A connected in anticoincidence were placed. Out of these Fig. 1 shows 33 counters, the axis of which is perpendicular to the plane of the Figure. For the sake of clarity the remaining five counters each at the two sides have not been drawn.

The block diagram of the arrangement is represented in Fig. 2. The pulses of counters B are each applied to the shaping circuits F, re-transmitting a large negative quenching pulse to the G. M.-counters, and besides shaping the G. M.-pulses into uniform pulses of $2 \mu\text{sec}$ width. The pulses of the shaping circuits

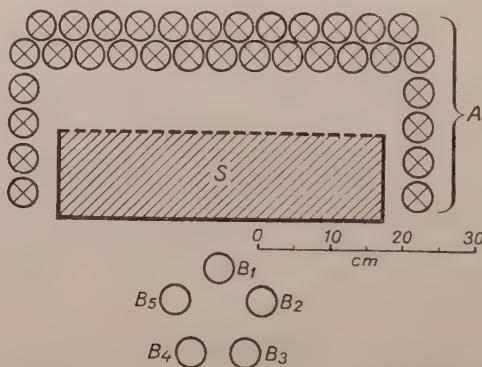


Fig. 1. Geometry of the arrangement. The sensitive length of counters B is 80 cm, the inner diameter 4 cm. The corresponding data of counters A are 135,5 and 3,8 cm, respectively. The counters consist of a copper cylinder of 0,1 cm wall thickness. The efficiency of the G. M.-counters used in the present experiment is over 99,8% [9]. The counters were mounted onto a wagon moving on rails so as to vary the absorber thickness easily.

are applied to the five-fold coincidence system K. Showers produced by cosmic ray particles in absorber S which discharge all the five counters B are recorded by the end stage V.

The coincidence pulses — after passing through one of the cathode followers C, then through units D and FF — are applied to the anticoincidence system AK. Pulses from AK can be registered by recording circuit V₁ only when the fivefold coincidences (B₁ B₂ B₃ B₄ B₅) are not accompanied by the simultaneous discharge of any of the counters A, i. e. when the fivefold coincidence is due to a photon falling on the absorber S. The pulses of counters A reduced to about $12 \mu\text{sec}$ are fed through the cathode follower C₁ and amplifier E to the anticoincidence system AK.

For the reliable operation of the anticoincidence arrangement it is necessary to delay the coincidence pulse. This was performed by differentiating the positive coincidence pulse of $2 \mu\text{sec}$ in unit D, the positive part of the differentiated pulse was cut off and the negative part was transmitted through the phase reverser FF. The pulse thus delayed by $2 \mu\text{sec}$ overlaps with certainty the pulse of $12 \mu\text{sec}$ width of the amplifier E.

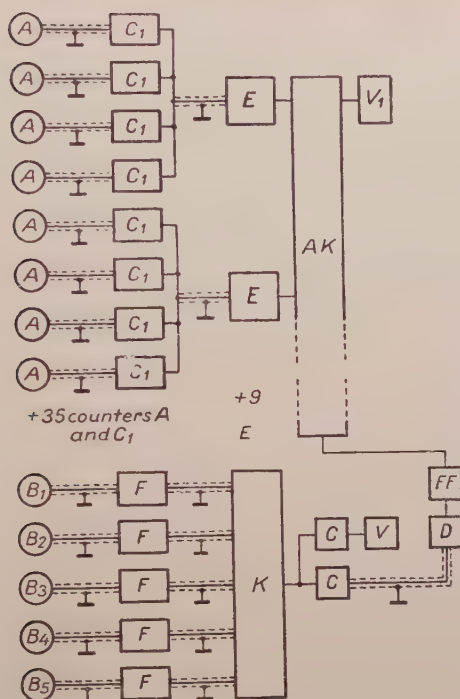


Fig. 2. Block diagram of the electronics of the arrangement

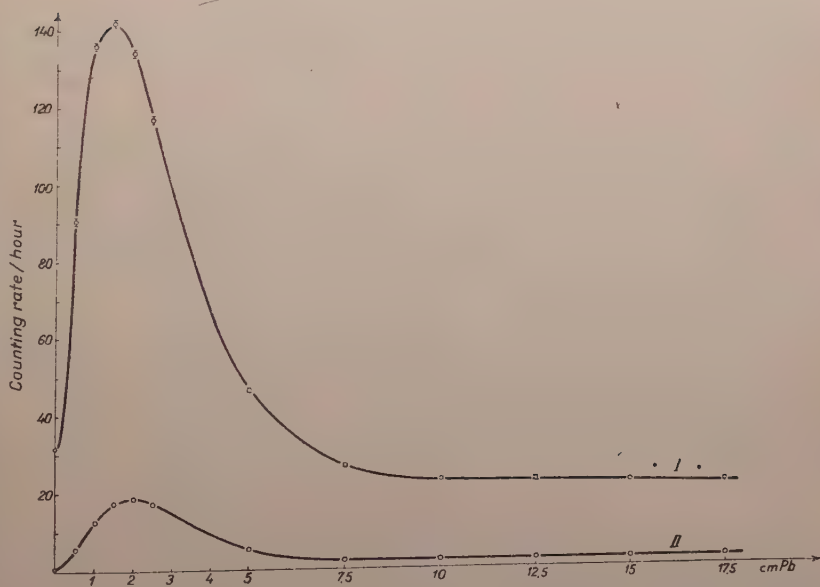


Fig. 3. Curve I represents the rate per hour of fivefold coincidences, curve II the rate per hour of anticoincidences. In measured points denoted by a circle only the standard error is less or equal the radius of the circle

Results

The results obtained in the course of the measurements are shown in Table I and in Fig. 3. Curve I represents showers produced by ionizing particles and by photons. Curve II corresponds to showers due to photons. Subtracting the ordinates of Curve II from those of Curve I the rate of fivefold coincidences caused by ionizing particles can be obtained. In Fig. 4 the rates of showers

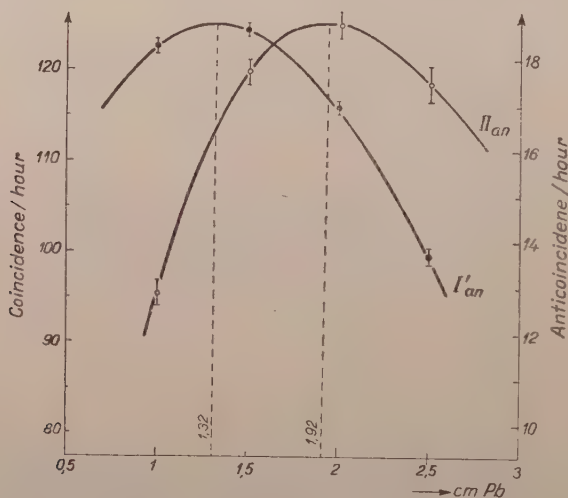


Fig. 4. The rate per hour of showers generated by ionizing particles and photons, respectively, at 1, 1.5, 2 and 2.5 cm lead thicknesses. The dots and circles represent the number of showers due to ionizing particles and photons, respectively

Table I

Pb (cm)	Duration of measurement (hour)	Coincidence per hour	Anticoincidence per hour
0,0	82	$31,3 \pm 0,6$	$0,5 \pm 0,08$
0,5	97	$90,3 \pm 1,0$	$5,8 \pm 0,3$
1,0	135	$135,4 \pm 1,0$	$12,8 \pm 0,3$
1,5	184	$142,0 \pm 0,9$	$17,7 \pm 0,3$
2,0	184	$134,4 \pm 0,9$	$18,7 \pm 0,3$
2,5	148	$116,9 \pm 0,9$	$17,4 \pm 0,4$
5,0	111	$46,1 \pm 0,7$	$5,8 \pm 0,2$
7,5	91	$26,9 \pm 0,6$	$2,6 \pm 0,2$
10,0	573,5	$22,5 \pm 0,2$	$2,35 \pm 0,07$
12,5	46	$22,4 \pm 0,7$	$2,3 \pm 0,2$
15,0	106	$22,3 \pm 0,5$	$2,4 \pm 0,2$
17,5	174	$21,4 \pm 0,4$	$2,4 \pm 0,1$

generated by ionizing particles and photons are represented at 1, 1.5, 2 and 2.5 cm lead thicknesses. The full-drawn curves I'_{an} and II_{an} are obtained by approximating the measured values by analytical functions. The maximum of curve I'_{an} for showers due to ionizing particles is at 1.32 cm, that of Curve II_{an} corresponding to showers due to photons occurs at 1.92 cm. The value obtained for the shift of maximum is (0.6 ± 0.08) cm. Naturally, because of measuring errors different curves from those described above could have been plotted, and thus different values for the shift might be found. The statistical errors in the curves of Fig. 4 show, however, the shift to the right of the maximum for photon initiated showers to be significant.

Our result is in good agreement with the prediction of the cascade theory. Namely, according to the cascade theory the maximum number of electrons in photon initiated showers occurs at a thickness of absorber greater by half a cascade unit than in case of primary electrons of the same energy as the photons. The particles of cosmic radiation are, however, not monoenergetic and thus an exact quantitative value for the shift cannot be given.

Another circumstance has to be considered in the critical examination of the result obtained. In the present experiment — strictly speaking — the maximum position of the curve of ionizing particles, and not of electrons was compared with the maximum position of the photon curve. It may be assumed, however, that showers due to μ -mesons do not considerably affect the position of the maximum in the curve of ionizing particles.

From our measurements no conclusions could be drawn as to the ratio f/e of showers generated by photons and electrons. The determination of the ratio f/e requires on the one hand the knowledge of the rate of showers produced by μ -mesons; on the other hand, it is obvious that the electrons which accompany the photons giving rise to the showers discharge the counters A, and the given shower is registered by the arrangement as one due to ionizing particles. Consequently, the observed rate of photon initiated showers is less than the real rate. This effect may be important as was shown by the following indirect measurement.

Dividing the counters A into two groups equal in number, both groups were connected in coincidence with the fivefold coincidence counters. The resulting sevenfold coincidences ($A_1A_2B_1B_2B_3B_4B_5$) indicate that at least two ionizing particles arrived at the surface of counters A which gave rise to a shower in the lead absorber such as to discharge all the five counters B. According to the result obtained, not less than about 30% of the fivefold coincidences was accompanied by a sevenfold coincidence.

In the experiments described in the literature — with two exceptions — the influence of μ -mesons and of showers falling on the arrangement was not taken into account. One of the exceptions is the measurement by REGENER [2], in the course of which, however, the anticoincidence counters placed beside

the absorber for screening out side showers prevented the registering of showers produced by ionizing particles falling in from side directions. At the same time these counters did not restrict the counting of photon produced showers. Thus on account of the geometrical arrangement REGENER overestimated the value of the ratio f/e . Using REGENER's method, any value for f/e can be obtained. E. g. applying REGENER's measurement of two steps, we also succeeded in getting his result. Out of the counters A only the five counters each at both sides of the absorber were kept at operating voltage (Fig. 5), the rest was made inactive

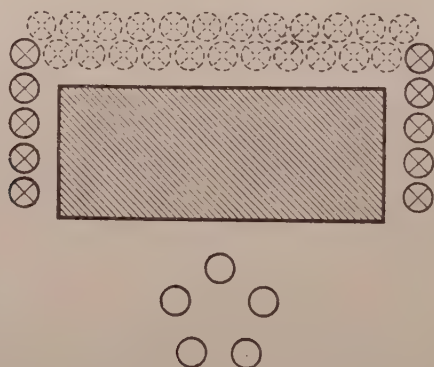


Fig. 5. Geometrical arrangement for the reproduction of REGENER's procedure. Counters drawn with broken lines were disconnected when recording showers due to all particles

With this method showers generated by all particles were recorded. The photon showers were measured by keeping all counters A at operating voltage. Obviously, if less than five of the counters at each side were operating, the value obtained for the ratio of the counting rates of the two curves varied accordingly.

REGENER determined the rate of μ -meson initiated showers by a theoretical estimate. The starting point of the calculation was the assumption that all showers found at great thicknesses are due to mesons. However, measurements carried out e. g. by SPIVAK [3] as well as our measurements indicate that the pulse rate observed at great absorber thicknesses cannot be entirely ascribed to the penetrating component, since a considerable part of the pulse rate is due to soft particles arriving from inclined directions at the sides of the absorber.

The second of the two exceptions mentioned above is the experiment of CLAY and LEVERT [6]. They determined through measurements the rate of showers produced by mesons at a given thickness of absorber. The measuring method used by them involves two disturbing effects which to some degree compensate one another, the extent of this compensation, however, cannot be determined.

Control measurements

At great thicknesses of lead the photon initiated showers are stopped inside the absorber. The rate of showers due to other neutral particles is inconsiderable. At great lead thicknesses, however, the ordinates of curve II in Fig. 3 differ from zero. Whether or not this effect is due to the defective operation of the counter set A or the anticoincidence arrangement, was investigated in the following way. Counters B connected in threefold coincidence were placed as shown in Fig. 6. In case of a threefold coincidence one of the counters A had to discharge as well, consequently no count from the anticoincidence arrangement

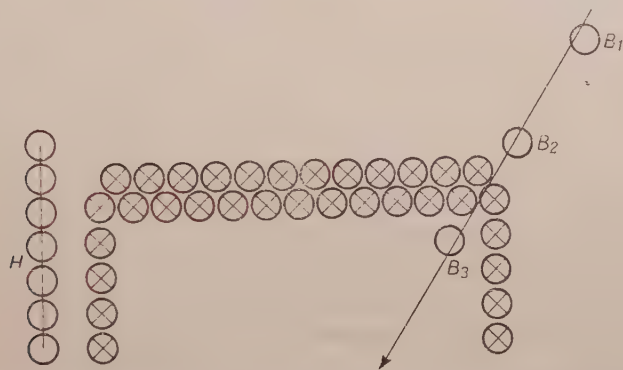


Fig. 6. Geometry of checking measurements investigating the origin of counting rates at great absorber thicknesses. The arrow through counters B indicates the path of an ionizing particle. Positions of counters B and H were varied!

could be expected. By varying the positions of counters B the operation of the arrangement was proved to be reliable.

A similar result was obtained with the following method. Counters H which were connected in parallel were coupled in coincidence with the anticoincidence counters. The occurrence of a coincidence indicated that the fivefold coincidence $(B_1 B_2 B_3 B_4 B_5)$ was produced by an ionizing particle traversing the counter set H and on account of some deficiency none of the counters A was discharged or the anticoincidence circuit failed to operate. By placing the counters H in different positions the reliability of the arrangement was ascertained. This method showed, however, that side showers passing through the gap between the bottom counters of set A and the ground give rise to a considerable effect, namely at large absorber thicknesses about half of the counting rate corresponding to curve II is due to such side showers.

Besides the side showers photons falling on the lower edges of the absorber are responsible for the significant ordinates of curve II at great lead thicknesses.

Evidence for this effect was provided by indirect measurement. Two counters, each of the side counters A were disconnected, thus the ionizing particles

incident at the lower edges of the absorber could also produce anticoincidence pulses. Now the counting rate of anticoincidences showed a significant increase of more than twice the original rate. Thus the effect proved to exist for ionizing particles; obviously it will occur in the case of photons as well.

The arrangement containing 48 G. M.-counters, nearly 100 electronic tubes and numerous other component parts was operated continuously for several months, therefore it was necessary to carry out regularly thorough checking. We enumerate briefly some of the testing procedures.

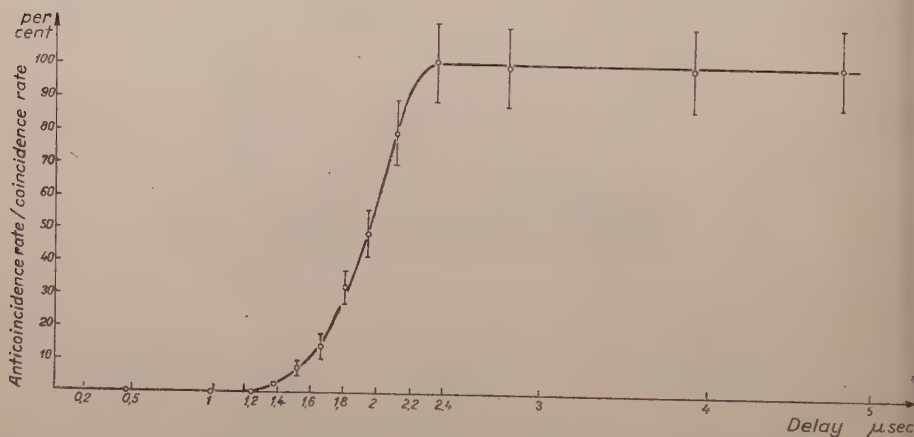


Fig. 7. Result of measurements confirming that the delay of the coincidence pulse was sufficient. On the horizontal axis the values of delay of the pulse triggering the anticoincidence arrangement are plotted

Connecting one of the five counters B to a voltage lower than operating voltage, the recording circuits are prevented from counting pulses. This method proved the efficiency of the filtering units.

By keeping counters A below operating voltage, each of the coincidence pulses is made to trigger the recording circuit of the anticoincidence system as well. Thus the readings at the recording circuits of the coincidence and anticoincidence systems have to be identical, that is, the two circuits have to count parallel.

The anticoincidence system must not count a coincidence pulse if this was accompanied by a discharge of some of the counters A. So as to check the reliability of the arrangement in this respect, instead of the pulse of counters A, the pulse of one of the counters B was transmitted through the cathode follower C_1 to the anticoincidence circuit, and through an auxiliary cathode follower the pulse of the same counter B was also applied to one of the channels of the coincidence circuit. (The auxiliary cathode follower was needed to prevent the large negative pulse of unit F from reaching the anticoincidence circuit.) In this

way at the occurrence of each fivefold coincidence a pulse was transmitted to the anticoincidence system as well, thus the latter could not respond. This check was often repeated with fewer than fivefold coincidences and thus on account of the higher counting rate a shorter period was required to ascertain the reliable operation of the arrangement.

The method described here was also used for checking the delay of the coincidence pulse. The pulse of the above counter B applied to the anticoincidence system was delayed by means of a delay line. Up to a delay of $1 \mu\text{sec}$ no anticoincidence pulse appeared, then with increasing delay, after a transitional phase, parallel counting of the two systems took place (Fig. 7). The transitional phase arises mainly through the spontaneous delays of the pulses of counter B triggering the anticoincidence system and the delay line, respectively. From Fig. 7 it can be seen that the delay of $2 \mu\text{sec}$ used here is certainly sufficient.

The curve of μ -meson initiated showers

Concerning the Rossi-curve of showers initiated by μ -mesons only one measurement carried out by SCHWEGLER [10] is available, it is, however, not free from mistakes. As the next step in our series of measurements the rate of

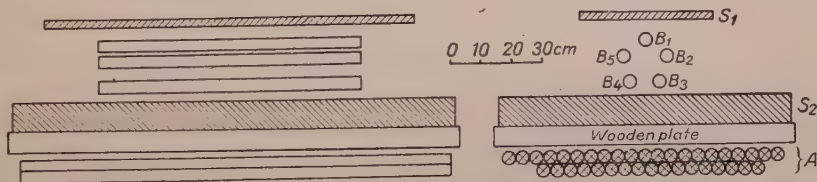


Fig. 8. Geometrical arrangement for investigating meson showers

showers produced by mesons was investigated as a function of the thickness of absorber.

The arrangement was modified as follows. The counter set A was placed below a lead absorber of 10 cm located under the five counters B (see S_2 , Fig. 8). In case a fivefold coincidence is due to a particle belonging to the soft component of cosmic radiation and falling on S_1 , the shower is absorbed in S_2 , and thus the counters A are not discharged, therefore the anticoincidence system gives a count. On the other hand, mesons are able to traverse S_2 and discharge the counters A. Therefore fivefold coincidences due to mesons are not accompanied by a discharge of the anticoincidence system. Summing up: The coincidence system counts showers produced by all the particles, and the anticoincidence system those due to the soft component. The difference of the two counting rates corresponds to the number of showers produced by mesons.

The experimental results are shown in Table II and Fig. 9. In the Table under K'/T the rate per hour of showers due to all particles, under M'/T the rate of meson showers per hour together with the standard error is given, T being the duration of measurement.

Table II

Pb (cm)	T	K'/T	M'/T
0,0	23	$11,6 \pm 0,7$	$7,2 \pm 0,6$
0,2	43	$27,2 \pm 0,8$	$11,7 \pm 0,5$
0,5	46	$60,0 \pm 1,1$	$19,0 \pm 0,6$
0,7	23	$91,0 \pm 2,0$	$26,0 \pm 1,1$
1,0	70	$127,0 \pm 1,3$	$35,2 \pm 0,7$
1,5	56	$151,8 \pm 1,6$	$43,1 \pm 0,9$
2,0	42	$147,4 \pm 1,9$	$42,5 \pm 1,0$
2,5	46	$129,7 \pm 1,7$	$43,1 \pm 1,0$
3,0	22	$111,0 \pm 2,2$	$38,7 \pm 1,3$
3,5	44	$93,9 \pm 1,5$	$37,2 \pm 0,9$
5,0	67	$52,0 \pm 0,9$	$25,9 \pm 0,6$
7,5	16	$28,6 \pm 1,3$	$19,7 \pm 1,1$
10,0	41	$26,1 \pm 0,8$	$18,8 \pm 0,7$
12,5	45	$24,7 \pm 0,7$	$18,1 \pm 0,6$
15,0	66	$23,0 \pm 0,6$	$16,8 \pm 0,5$
17,5	40	$22,2 \pm 0,7$	$16,0 \pm 0,6$

It is remarkable that the curve M' of Fig. 9 has a maximum. This can be assigned to the showers of soft particles accompanying the meson, and will be discussed later in more detail.

It can also be seen that the two curves do not coincide even for large values of S_1 , although one can expect that at large values of S_1 only mesons are able to give rise to fivefold coincidences. However, two circumstances have to be considered. Firstly, the meson producing a fivefold coincidence may arrive at S_1 from such an inclined direction that it cannot traverse counters A. So as to avoid this, the surfaces of S_2 and of the counters A ought to be chosen extremely large. As has been remarked further above, in case of great absorber thicknesses photons and electrons falling from side directions on the absorber may contribute to the counting rates obtained for the horizontal section of the Rossi-curve. The showers of such particles are contained in K' , but not in M' , these showers being absorbed in S_2 .

The absorption of mesons in S_2 also contributes to the difference of ordinates; this, however, is of secondary importance as compared to the above two effects.

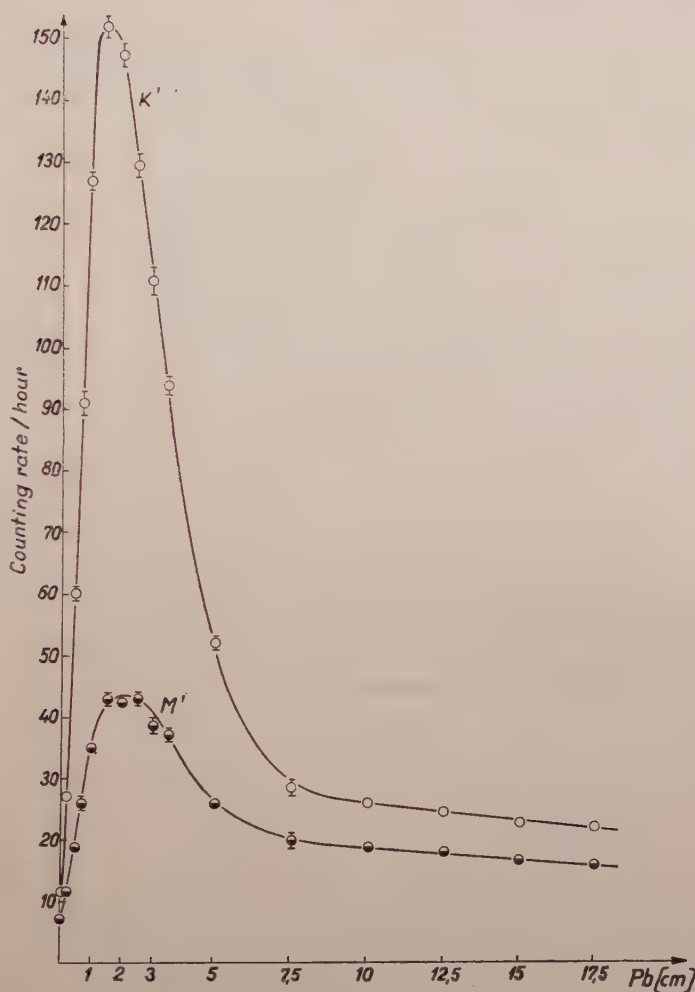


Fig. 9. Rossi curve representing counts of all particles (K') and of mesons (M'). In such points where the size of the error is not indicated, the error is at most the radius of the circle showing the counting rate

The curve of μ -meson produced showers when showers of great density falling on the absorber are eliminated

As was shown above, the maximum in M may be attributed to showers of soft particles accompanying the meson. The presence of such particles may distort the results relating to the transition curves [11].

The effect of incident showers was reduced in the following way. At both sides of S_1 four G. M.-counters were placed each of 135.5 cm sensitive length and connected in anticoincidence with the fivefold coincidence ($B_1 B_2 B_3 B_4 B_5$)

(Fig. 10, counters A). Thus the anticoincidence arrangement recorded only those fivefold coincidences which were not accompanied by the discharge of counters A, i.e., no ionizing particle discharging the counters A arrived simultaneously with the particle producing the shower.

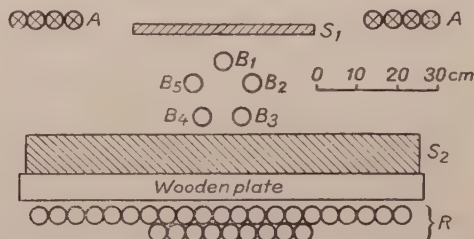


Fig. 10. Location of counters A reducing the effect of incident showers.

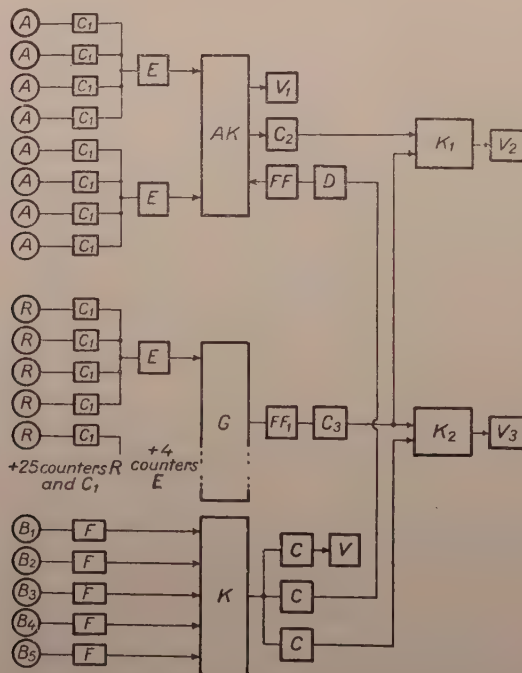


Fig. 11. Block diagram of the modified arrangement. Unit G serves for mixing pulses of counter R. FF_1 is a phase reverser, and C_3 a cathode follower

The counters R serving for the registration of mesons were placed below S_2 ; these counters were connected in coincidence with the fivefold coincidence counters, as well as with the anticoincidence counters. The recording circuit V_3 and the twofold coincidence system K_2 registered fivefold coincidences in such

cases when at the same time a meson crossed the counters R (Fig. 11). The two-fold coincidence system K_1 , or rather the recording circuit V_2 registered out of these events such as were not accompanied by the discharge of the counters A.

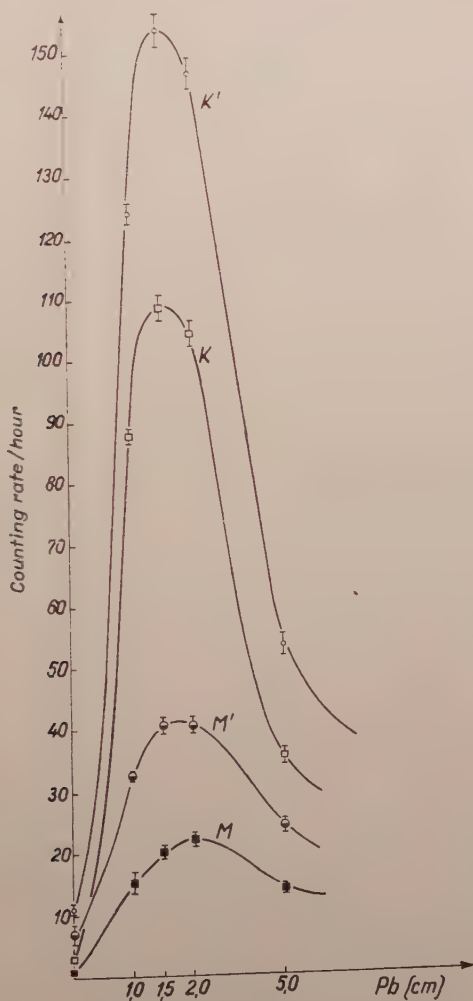


Fig. 12. Results obtained when incident showers are eliminated

Thus the arrangement recorded four different kinds of events, namely (1) fivefold coincidences (K'), (2) fivefold coincidences without a simultaneous discharge of counters A (K), (3) events K' coinciding with a meson passing through the counters R (M') and (4) events K given rise to by mesons (M). The results of the measurements are shown in Table III and Fig. 12.

Table III

Pb (cm)	T	K'/T	K/T	M'/T	M/T
0,0	23	$11,3 \pm 0,7$	$3,0 \pm 0,4$	$6,9 \pm 1,7$	$0,8 \pm 0,2$
1,0	47	$124,1 \pm 1,6$	$88,0 \pm 1,4$	$32,7 \pm 0,8$	$15,4 \pm 1,8$
1,5	20	$154,2 \pm 2,8$	$108,9 \pm 2,2$	$41,0 \pm 1,4$	$20,3 \pm 1,0$
2,0	23	$147,2 \pm 2,5$	$104,9 \pm 2,1$	$41,0 \pm 1,3$	$22,3 \pm 1,0$
5,0	21	$54,1 \pm 1,6$	$35,9 \pm 1,3$	$24,3 \pm 1,1$	$14,1 \pm 0,8$

It can be seen that the counting rates obtained when air showers falling on the apparatus are eliminated are essentially lower than the corresponding rates including the contribution of air showers. Relatively the greatest differences occur in the case with no absorber. This is obvious as without an absorber

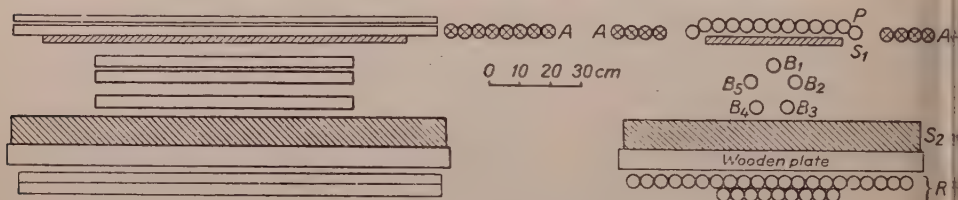


Fig. 13. Geometry of the arrangement for investigating showers initiated by different primaries. The surface of the 16 counters A is 7000 cm². The sensitive length of counters P is 135,5 cm.

chiefly the particles of air showers discharge the five counters B, and in such cases particles fall as well on counters A.

Using this arrangement the curve M' which is thus obtained is inside the error limit in agreement with the curve M' resulting from the previous measurement (Fig. 9). The amplitude of the maximum in the curve M is essentially smaller than that of the maximum of curve M' , demonstrating that the maximum in M' can be assigned to showers of soft particles associated with the meson.

This measurement was terminated after a short period as also in M a maximum appeared and thus it seemed to be reasonable to increase further the surface of counters A. At the same time the arrangement was modified in order to perform a further experiment.

Curves of showers produced by photons, electrons and μ -mesons

The number of counters A was increased by adding 8 counters of 80 cm length which were placed along one 45 cm long side of the absorber. Besides, 13 counters P connected in parallel were placed on top of S_1 (Fig. 13). The pulses of the counters P and the anticoincidence pulses were mixed in a twofold coincidence system. This system, and the recording circuit coupled to it registered

fivefold coincidences due to ionizing particles which were not accompanied by an ionizing particle discharging the counters A. Apart from the modification

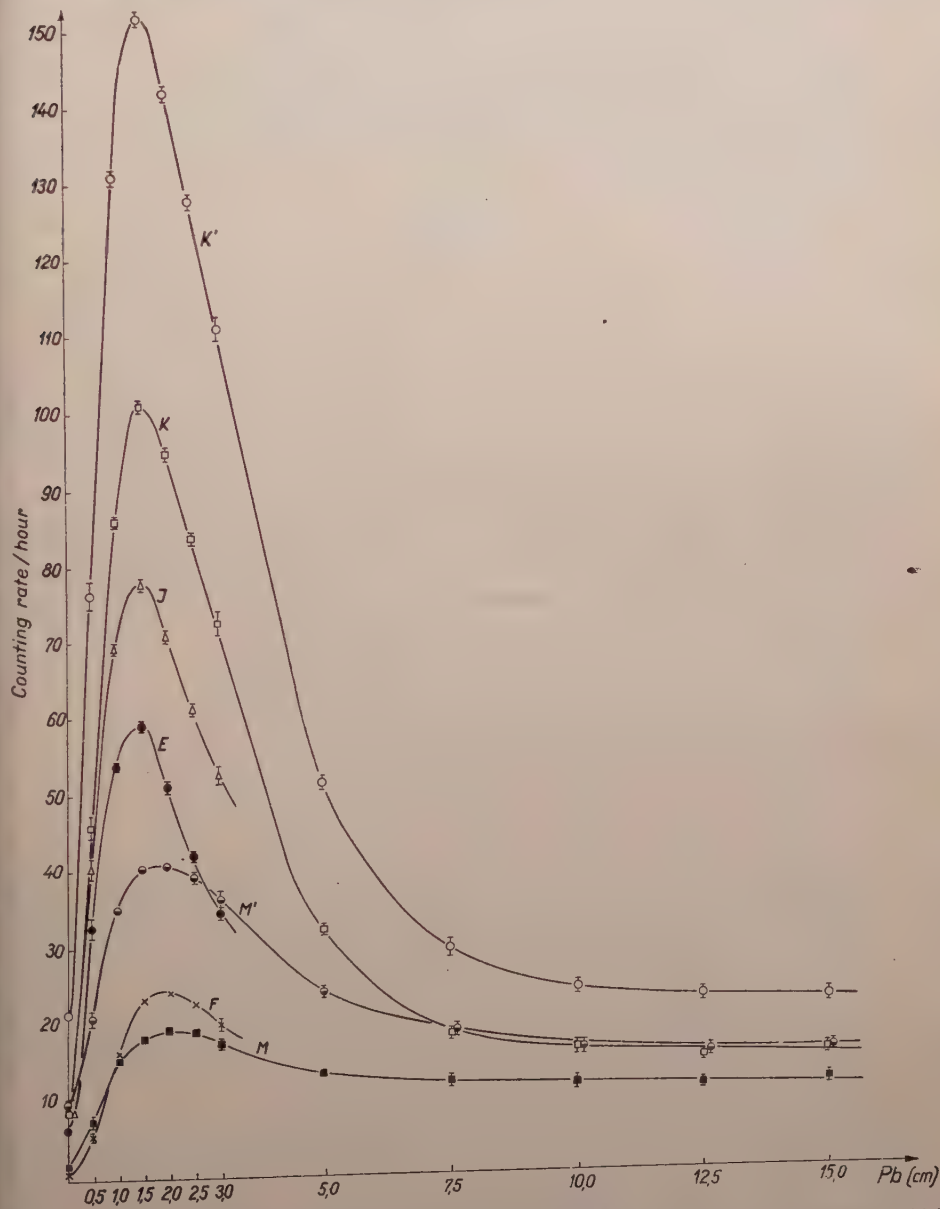


Fig. 14. Rate per hour of showers due to different primaries as a function of the absorber thickness. Curves denoted by letter without a dash represent the rate per hour of events in those cases when the counters A are not discharged

outlined here the arrangement remained the same as that described in the preceding section.

Through this modification we succeeded in obtaining, besides the curve of mesons, the curves of electrons and photons as well. Our arrangement registered the number of showers due to ionizing particles (I) and to mesons (M). The difference of the two gave the rate E of showers produced by electrons. Furthermore the difference of K and I supplied the number F of showers initiated by photons. Thus with our arrangement showers due to photons, electrons and μ -mesons could be separated. The results of these measurements are collected in Table IV and plotted in Fig. 14.

Table IV

Pb (cm)	T	K'/T	K/T	M'/T	M/T	I/T	F/T	E/T
0,0	45	$21,4 \pm 0,7$	$8,8 \pm 0,4$	$9,9 \pm 0,5$	$1,9 \pm 0,2$	$8,5 \pm 0,4$	$0,3 \pm 0,08$	$6,5 \pm 0,4$
0,5	21	$76,3 \pm 1,9$	$46,0 \pm 1,5$	$20,9 \pm 1,0$	$7,6 \pm 0,6$	$40,4 \pm 1,4$	$5,6 \pm 0,5$	$32,8 \pm 1,3$
1,0	142	$131,1 \pm 1,0$	$85,9 \pm 0,8$	$35,2 \pm 0,5$	$15,5 \pm 0,3$	$69,3 \pm 0,7$	$16,56 \pm 0,34$	$53,8 \pm 0,6$
1,5	173	$152,2 \pm 0,9$	$101,2 \pm 0,8$	$40,6 \pm 0,5$	$18,3 \pm 0,3$	$77,7 \pm 0,7$	$23,53 \pm 0,37$	$59,4 \pm 0,6$
2,0	155	$142,3 \pm 1,0$	$94,9 \pm 0,8$	$40,8 \pm 0,5$	$19,5 \pm 0,4$	$70,7 \pm 0,7$	$24,20 \pm 0,39$	$51,2 \pm 0,6$
2,5	123	$127,9 \pm 1,0$	$83,8 \pm 0,8$	$39,5 \pm 0,6$	$19,1 \pm 0,4$	$61,2 \pm 0,7$	$22,69 \pm 0,43$	$42,1 \pm 0,6$
3,0	40	$111,5 \pm 1,7$	$72,6 \pm 1,4$	$36,4 \pm 1,0$	$17,5 \pm 0,7$	$52,2 \pm 1,2$	$20,1 \pm 0,7$	$34,7 \pm 0,9$
5,0	66	$51,6 \pm 0,9$	$32,3 \pm 0,7$	$24,1 \pm 0,6$	$13,4 \pm 0,5$			
7,5	21	$29,6 \pm 1,2$	$18,3 \pm 0,9$	$18,8 \pm 0,9$	$12,0 \pm 0,7$			
10,0	20	$24,1 \pm 1,1$	$16,2 \pm 0,9$	$16,2 \pm 0,9$	$11,6 \pm 0,8$			
12,5	23	$22,9 \pm 1,0$	$14,7 \pm 0,8$	$15,4 \pm 0,8$	$11,0 \pm 0,7$			
15,0	24	$22,6 \pm 1,0$	$15,5 \pm 0,7$	$15,8 \pm 0,8$	$11,6 \pm 0,7$			

The counters P were used only for small thicknesses of S_1 , since the counters P at greater thicknesses cannot cover the sides of the absorber. A comparison with the preceding measurement shows that the use of the 8 supplementary counters A reduced the values of the ordinates of K and M . The first part of the curve is higher than that in the preceding measurement. This is due to the fact that in case of no absorber the rate of counts was increased by the multiplication occurring in the counters P.

Comparing the photon curve (Curve II) in Fig. 3 with the curve F obtained here one can see that the ordinates of the curve F are somewhat bigger than those of curve II. This is firstly due to the fact that curve II was based on measurements with counters arranged in two layers, secondly, the presence of S_1 increased the number of reflected particles and thus the density of shower particles.

Making use of the results already discussed we may compare the positions of maxima in the curves E and F . In Fig. 15 the counting rates at the points

around the maxima are given. The measured values here were approximated by two analytical functions agreeing in four points each with the given values. Their maxima thus obtained were shifted by

$$x_{Fan}^{\max} - x_{Ean}^{\max} = (0,43 \pm 0,08) \text{ cm}.$$

Thus, the maximum rate of showers due to photons was shifted to the right as compared to the maximum rate of showers due to electrons.

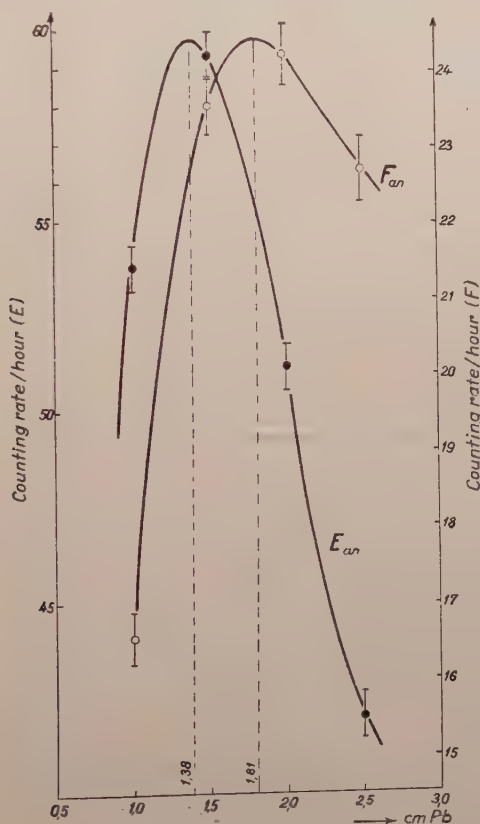


Fig. 15. Counting rates of E and F for four absorber thicknesses around the maximum

The maximum counting rate for showers initiated by photons was found at 2 cm, for showers initiated by electrons at 1.5 cm thickness of absorber. The ratio of maximum counting rates is

$$f/e = 0,41 \pm 0,008.$$

This value gives the lower limit for the actual value since, though the counters A eliminate events due to showers of great density, it may occur that no ionizing particle arrived at the counters A, whereas the counters P received

more than one particle. In this case — although it was a photon which gave rise to the fivefold coincidence — on account of the ionizing particle simultaneously falling on the counters P the shower is recorded by the arrangement as one due to the ionizing particle.

By using a hodoscope it was found that in 20 per cent of the fivefold coincidence events no ionizing particle fell on the counters A, but more than one such particle fell on the counters P.*

The use of a large number of G. M.-counters and vacuum tubes required a regular check of the arrangement. As an example one of the testing procedures should be mentioned.

The pulses of counters R and P were replaced each by a pulse of one of the counters B (e. g. B_1 and B_2) and applied to the electronic circuits coupled to the counters R and P. At the same time B_1 and B_2 triggered the fivefold coincidence arrangement as well. Disconnecting the voltage of the counters A, the counting rates registered by all the five recording circuits should be identical.

Thanks are due to our colleague G. BOZÓKI for contributing to the designing of the arrangement.

REFERENCES

1. L. JÁNOSSY and B. ROSSI, *Proc. Roy. Soc. A*, **175**, 88, 1940.
2. V. H. REGENER, *Ric. Scient.*, **18**, 66, 1940.
3. P. SPIVAK, *Journ. Phys. USSR*, **5**, 5, 1941.
4. N. NERESON, *Phys. Rev.*, **61**, 111, 1942.
5. B. TRUMPY, *D. Kgl. Danske Vidensk. Selskab. Mat.-fys Medd.*, **20**, 6, 1943.
6. J. CLAY and C. LEVERT, *Physica*, **12**, 321, 1945.
7. S. FRANCHETTI, *Nuovo Cimento*, **10**, 551, 1953.
8. C. MILONE, *Nuovo Cimento*, **10**, 1744, 1953.
9. E. FENYVES, *Acta Phys. Hung.*, **4**, 363, 1955.
10. A. SCHWEGLER, *Z. Physik*, **96**, 62, 1935.
11. G. CARMOUZE and J. DAUDIN, *C. Rendus*, **231**, 572, 1950 ; **232**, 2018, 1951 ; J. DAUDIN and TSAI-CHÜ, *C. Rendus*, **234**, 1277, 1952.
12. Л. Н. Кораблев, *ДАН* **62**, 215, 1948., **69**, 643, 1949 ; **75**, 375, 1950.

ИССЛЕДОВАНИЯ В СВЯЗИ С КРИВОЙ РОССИ

Л. ЯНОШШИ и Л. НАДЬ

Резюме

С помощью установки антисовпадений были разделены ливни, возникающие в свинце от фотонов и от ионизирующих частиц. Наибольшее число ливней от фотонов наблюдалось при толщине поглотителя на $(0,6 \pm 0,09)$ см больше, чем при максимуме ливней ионизирующих частиц.

С установкой, после добавки соответствующих приборов, удалось разделить ливни фотонов, электронов и μ -мезонов. Счетчики с большой поверхностью, расположенные около поглотителя и включенные по схеме антисовпадений, исключали из регистрации те моменты, когда на установку, совместно с частицей вызывающей ливни, падали распространенные воздушные ливни. Относительное смещение максимумов на кривых проникновения фотонов и электронов получилось $(0,4 \pm 0,08)$ см. Значение отношения максимумов этих двух кривых в нижнем пределе оказалось $f/e = 0,41 \pm 0,008$.

*We express our thanks also herewith to Professor DOBROTIN for making available cold cathode triggering tubes developed by KORABLEV [12], together with directions for the servicing of hodoscope types containing such triggering tubes.

ÜBER DIE ZÜCHTUNG KÜNSTLICHER QUARZKRISTALLE

Von

J. NAGY und I. TARJÁN

MEDIZINISCH-PHYSIKALISCHES INSTITUT DER MEDIZINISCHEN UNIVERSITÄT, BUDAPEST

(Eingegangen: 17. I. 1956)

Von den Verfahren zur Herstellung künstlicher Quarzkristalle hat sich das von WALKER und BEUHLER, ferner das von WOOSTER und Mitarbeitern beschriebene am besten bewährt [1]. Dieses Verfahren wurde auch von uns in den vor einigen Jahren durchgeführten Züchtungen angewandt [2]. Im nachstehenden seien in Verbindung damit einige charakteristische Angaben besprochen, auf Grund derer es möglich ist, Vergleiche über die in verschiedenen Temperaturbereichen und bei verschiedenen grossen Autoklavfüllungen durchgeführten Züchtungen zu ziehen.

Die Versuche erfolgten in Autoklaven von etwa 28 cm Länge und 1,9 cm Innendurchmesser, die mit Hilfe von »Schraubenstopfen« zugeschraubt und so verschlossen wurden. Die Dichtung wurde durch eine Kupferscheibe gewährleistet. Als Lösungsmittel diente eine Lösung von 5% Na_2CO_3 + 0,4% KOH. Das Grundmaterial bestand aus verschiedenen grossen Körnern eines kristallinen Quarzabfalls. Für die Kernkristalle standen uns AT-Schnitte von $2,15 \cdot 9,4 \cdot 11 \text{ mm}^3$ zur Verfügung, die auf einen Silberfaden aufgehängt wurden, und zwar in jedem Versuch zwei übereinander.

Die charakteristischeren Messergebnisse sind in der Tabelle I zusammengefasst. Da mit AT-Schnitten gearbeitet wurde, ist — abweichend vom allgemeinen Brauch — anstatt des Zuwachses in der Richtung der Z-Achse die Gewichtszunahme in Prozenten angegeben.

Die Versuche Nr. 1—4 erfolgten bei niedriger Temperatur, bei der die Löslichkeit laut KENNEDY [3] mit der Temperatur monoton zunimmt, und zwar gleicherweise bei kleinen und grossen Füllungsmengen. In den in der Tabelle angeführten Versuchen wurden Füllungsmengen benutzt, bei denen das Lösungsmittel auch bei Betriebstemperatur in zwei Phasen anwesend war, so dass der Druck im Autoklaven dem jeweiligen gesättigten Dampfdruck entsprach. Die Kernkristalle hingen in der flüssigen Phase des Lösungsmittels. Der an kälteren Stellen befindliche Kern wuchs, wie dies auf Grund des Ansteigens der Löslichkeitskurven zu erwarten war, in jedem Falle. Allerdings konnte man infolge des langsamen Wachstums in den bisher angewandten Apparaturen an keine praktisch verwertbaren Züchtungen denken, obwohl die Verhältnisse vom tech-

nischen Standpunkt aus (niedrige Temperatur und geringer Druck) günstig wären.

Tabelle I

Versuchs- Nr.	Volumen der Füllung bei Zimmertemperatur %	Temperatur °C	Druck ca. atm.	Versuchsdauer Tage	Gewicht des Zuwachses · 100%
		oben unten			Gewicht des Kernes
					oberer Kristall unterer Kristall
1	40	270 280	56	48	— 130
2	66	270 280	56	48	200 140
3	80	250 280	40	18	65 62
4	80	250 260	40	29	110 100
5	36	448 460	480	10	—20 —10
6	29	493 520	560	6,3	—25! 15
7	29	493 520	560	6,3	39 25
8	43	401 417	368	7,5	—53 —31
9	49	401 418	412	7,5	31 27
10	55	400 420	510	7,5	240 150
11	75	380 400	1340	6	1000
12	80	370 395	1800	3,5	500

Die Versuche Nr. 5—7 wurden bei hohen Temperaturen ausgeführt, bei denen laut KENNEDY der Ablauf der Löslichkeitskurven ebenfalls bei jeder beliebigen Füllungsmengen monoton ansteigt. In unseren Versuchen wurden kleine Füllungsmengen verwendet, weil der kontinuierliche Betrieb bei grösseren Mengen wegen der grossen Drucke unsicher wurde (es trat Entweichen des Dampfes und Kriechen des Autoklavenmaterials ein.) Das erwartete Wachstum

unterblieb in einigen Fällen. Es handelte sich hier wahrscheinlich darum, dass es gerade bei kleinen Füllungen in gewissen Temperaturbereichen der Löslichkeitskurven auch abfallende Abschnitte gibt, durch die man sowohl bei der Erwärmung als auch bei der Abkühlung des Autoklaven hindurchgeht. Infolgedessen löst sich eine gewisse Zeit hindurch — bei Erwärmung und Abkühlung — der an kälterer Stellen befindliche Kernkristall bzw. fertige Kristall auf. Es kamen z.B. Fälle vor, wo sich die Kerne bei langsamer Erwärmung völlig auflösten, noch bevor die Betriebstemperatur erreicht wurde. Bei langsamer Erwärmung und Abkühlung und einem nur kurzen Betrieb kann es also vorkommen, dass man als Endergebnis eine Auflösung erhält, trotzdem der Kristall während des eigentlichen Betriebes gewachsen war. Auf diese Weise ist die z.B. im Versuch Nr. 5 beobachtete Auflösung zu erklären. Es handelt sich hier um eine prozentual grosse, aber dem Absolutwert nach um eine geringfügige Auflösung. Interessant ist ein Vergleich der Versuche Nr. 6 und 7. Im Versuch Nr. 6 erfolgte die Abkühlung langsam (etwa einen Tag lang), wobei der obere Kern sich auflösen begann. Im Versuch Nr. 7 wurde unter völlig gleichen Bedingungen gezüchtet, mit dem Unterschied, dass die Erwärmung rasch erfolgte und dass der Autoklav am Ende der Betriebszeit plötzlich mit einem Wasserstrahl auf Zimmertemperatur abgekühlt wurde. Infolge der plötzlichen Abkühlung unterblieb die Auflösung, so dass der Kristall ein Wachstum zeigte. Der Kern kann auch so vor einer grösseren Auflösung bewahrt werden, dass man bei der Erwärmung und Abkühlung längs des Autoklaven in den einzelnen Temperaturbereichen stets die entsprechende Temperaturverteilung sicherstellt. Vom praktischen Gesichtspunkt sind indessen die bei so hohen Temperaturen stattfindenden Züchtungen dennoch nicht vorteilhaft. Einerseits nimmt der selbst bei kleinen Füllungen auftretende, mittelstarke Druck bei hohen Temperaturen das Material des Autoklaven stark in Anspruch, andererseits ist bei kleinen Füllungen auch die Wachstumsgeschwindigkeit nicht hinreichend schnell.

Die Versuche Nr. 8—12 wurden bei mittleren Temperaturen ausgeführt. Diese Temperaturen fallen in jenen Bereich, in dem die Löslichkeitskurve bei kleinen Füllungen auch einen abfallenden Abschnitt besitzt. Bei kleineren Füllungen muss sich also der an kälteren Stellen befindliche Kernkristall auflösen und nur bei Anwendung grösserer Füllungen wird man ein Wachstum erwarten dürfen. Diese Erscheinungen gehen aus einem Vergleich des Versuches Nr. 8 mit den nachfolgenden Versuchen hervor.

Auffällig ist das starke Wachstum in den Versuchen Nr. 11 und 12, bei denen grosse Füllungen benutzt wurden. Diese Versuche erfolgten unter Verhältnissen, wie sie bei Züchtungen im allgemeinen zu herrschen pflegen. Es unterliegt keinem Zweifel, dass zur Züchtung von Quarzkristallen in den bisher angewandten Apparaturen der Temperaturbereich von 370—410°C und ein Füllungsvolumen von 70—80% am günstigsten sind. Das in den Versuchen

Nr. 11 und 12 erhaltene Wachstum zeigte ungefähr das Ausmass, das von den ungarischen und ausländischen Verfassern als das grösste erreichbare Wachstum bezeichnet wird. Dieses Wachstum entspricht der erhaltenen Wachstumsgeschwindigkeit von etwa 1 mm/Tag in der Richtung der Z-Achse, bei der sich noch Zuwachse ohne Einschlüsse und Risse erzielen lassen.*

LITERATUR

1. A. C. WALKER, E. BEUHLER, *Indust. Eng. Chem.*, **42**, 1369, 1950.
C. S. BROWN, R. C. KELL, L. A. THOMAS, N. WOOSTER, W. A. WOOSTER, *Mineralogical Magazine*, **XXIX**, 858—874, 1952.
2. Z. GYULAI, I. TARJÁN, GY. ZIMONYI, S. UJHELYI, *Fizikai Szemle* **2**, No. 4—5—6, 1952.
3. G. KENNEDY, *Econ. Geol.*, **45**, 629, 1950.

* Als die vorliegende Arbeit bereits im Druck war, erfuhren wir, dass es im Brush-Laboratorium gelungen ist, die im niedrigen Temperaturbereich gegebenen günstigen technischen Verhältnisse mit dem Wunsch nach grosser Wachstumsgeschwindigkeit dadurch zu vereinen, dass die in einem gesonderten Behälter hergestellte Lösung zu den in einem anderen Behälter befindlichen Kernen übergeführt wurde.

THE PARAMAGNETIC COTTON-MOUTON EFFECT IN DIPHENYL-PICRYL-HYDRAZYL AT MICROWAVES

By

P. HEDVIG

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE OF PHYSICS, BUDAPEST

(Received 9. III. 1956)

The paramagnetic resonance experiments are usually carried out in a TM-mode cavity resonator, so that the microwave magnetic field is always perpendicular to the external field. In this case only the absorption of the microwave radiation near the Larmor-resonance condition

$$\nu = \frac{g\beta H_e}{h}$$

can be investigated. Here ν means the frequency of the microwave radiation, β the Bohr magneton, h Planck's constant, H_e the external magnetic field, g the spectroscopic splitting factor.

When making the experiment in a TE_{11n} cavity ($n = 1, 2, 3, \dots$), the change of the state of polarisation of the microwaves can be observed. Some measurements were already made in this field, (RYTER and EXTERMAN [1], using TE_{111} cavity resonator and axial static magnetic field. The observed "Faraday rotation" of the plane of polarisation of microwaves showed a dispersion-shaped curve against the axial static magnetic field. BATTAGLIA, GOZZINI and POLACCO [2] made an experiment with $MnSO_4 \cdot H_2O$ in a transversal static magnetic field. The angle between the external field and the electric vector E of the incident wave was 45° . The measured effect was called "Cotton-Mouton effect", by optical analogy. In this case the observable effects are: absorption, dispersion, rotation of the plane of polarisation and ellipticity of polarisation. BATTAGLIA et al. observed the rotation and the ellipticity varying the external magnetic field.

We have investigated the transversal-field case (Cotton-Mouton effect) in the organic free radical *diphenyl-picryl-hydrazyl*. The experimental arrangement was the following (Fig. 4): The microwave radiation source was a 3,2 cm reflex klystron oscillator (RK.) A TE_{012} cavity wavemeter was coupled to the klystron through a Bethe hole coupler (B) with a coupling factor of about 40 db. Germanium crystal detector D_1 and the galvanometer G indicate the resonance of the cavity wavemeter. The microwave energy was fed into a

TE_{112} cavity by a flexible coaxial cable. The dimensions of the cavity were chosen very close to the cut-off wavelength, so that the inner wavelength $\lambda_g \approx 12$ cm. Thus the small, 2×2 mm cylindrical probe could be placed in an extremely homogeneous microwave magnetic field. The cavity was placed between the pole pieces of the electromagnet (M), which was capable of generating magnetic fields up to 10,000 Oersteds. The magnetic field was modulated around the 3000 Oersted resonance field by 50 c.p.s. alternating current. The resonance line was indicated by a cathode-ray oscilloscope. The amplifiers were simple audio-frequency types with an amplification factor of about 10^6 .

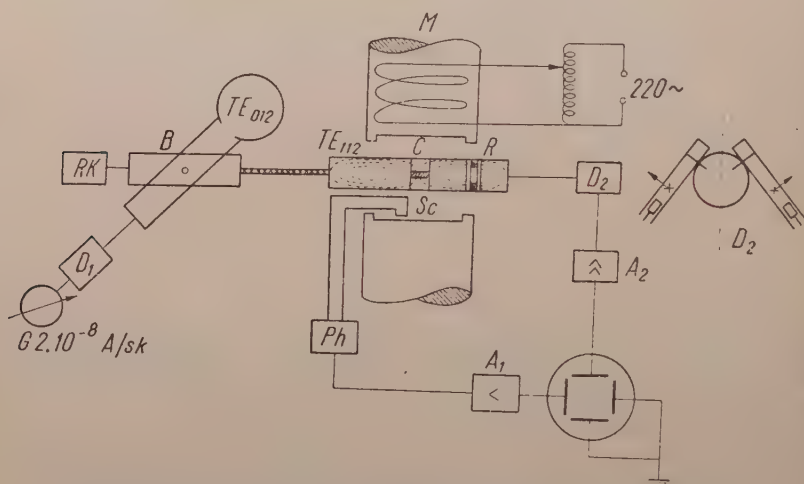


Fig. 1. The experimental arrangement with the ring-shaped ("R") and the cylindrical ("C") sample

The horizontal deflection of the CRO and the modulation were sinusoidal. The deflection voltage came from a search coil (Sc) through the variable phase shifter (Ph) and integrator and the (A_1) A. F. amplifier. The detector D_2 consists of two germanium crystals each being excited by two perpendicular components of the r.f. electric field (see Fig 1). Thus the rotation of the plane of polarisation and the absorption as well could be detected.

We made two sorts of measurements :

1. *The sample was placed in electric field maximum.* The resonator rotated around his symmetry axis between $(H_e, E) \angle = 0-90^\circ$. Here H_e is the external magnetic field vector, E the electric vector of the microwave radiation inside the cavity.

2. *The sample was in magnetic field maximum (and electric field minimum).* The resonator rotated in the same manner as in the case 1.

In case 1 the microwave magnetic field has only longitudinal components

near the wall of the cavity, therefore we used a ring-shaped sample. The field components are :

$$\begin{aligned} H_x &= 0, \\ H_y &= H_0 e^{i\omega t}, \\ H_z &= H_e. \end{aligned}$$

The axis of the cavity is in the y direction. In case 2 the microwave magnetic field has only transversal components. The maximum of the transversal field is at the axis of the cavity. Here we used a small cylindrical sample. In this case, there are two possibilities :

$$\begin{aligned} a) \quad H_x &= 0, \\ H_y &= 0, & (H_e, E) \angle = 90^\circ, \\ H_z &= H_e + H_0 e^{i\omega t} \\ b) \quad H_x &= H_e, \\ H_y &= 0, & (H_e, E) \angle = 0^\circ. \\ H_z &= H_0 e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

The axis of the cavity is in the y direction. Rotating the cavity around the axis, in case 1 the magnetic field components do not change. In case 2 the angle between the static and microwave magnetic field changes.

Some of the experimental results are shown in Fig. 2 and 3 corresponding to case 1 and 2, respectively. The figures are photographs of the oscilloscope screen corresponding to different (H_e, E) angles. The ordinates are proportional to the absorption of the waves. Fig. 4 shows the curve of rotation of the plane of polarisation against the constant external magnetic field, at $(H_e, E) \angle = 45^\circ$.

The results can be summarized as follows :

a) The observed absorption varies with the position of the sample in the cavity.

b) If the sample is in H maximum (case 2), we observe a decrease of the effect, when the cavity rotates around its axis of symmetry from $(H_e, E) \angle = 0^\circ$ to 90° , where there is no resonance absorption.

c) If the sample is in E maximum (case 1) there is also a decrease of the effect with the rotation of the cavity, but there is an easily detectable absorption even at $(H_e, E) \angle = 90^\circ$.

The line is *double-shaped*, and its character does not change with the rotation of the cavity. In this experiment we used a ring-shaped sample, as indicated in Fig. 1.

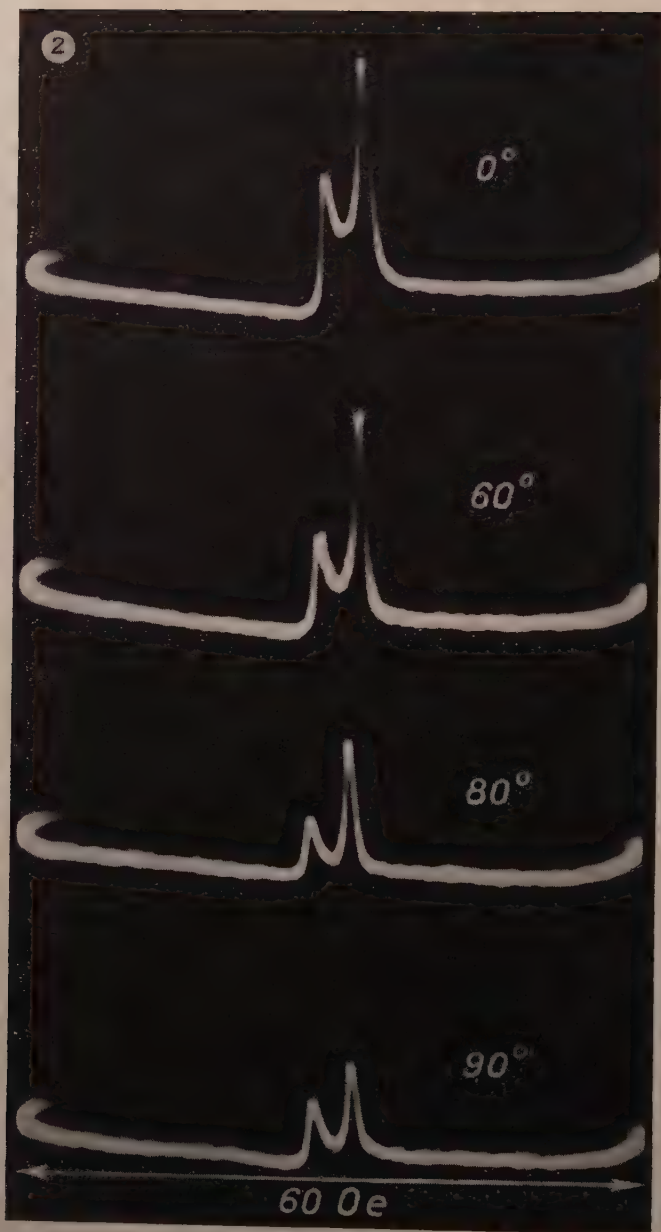


Fig. 2. Variation of the resonance absorption in diphenyl-picryl-hydrazyl with the angle (H_e, E), when the ring-shaped sample is placed in field maximum

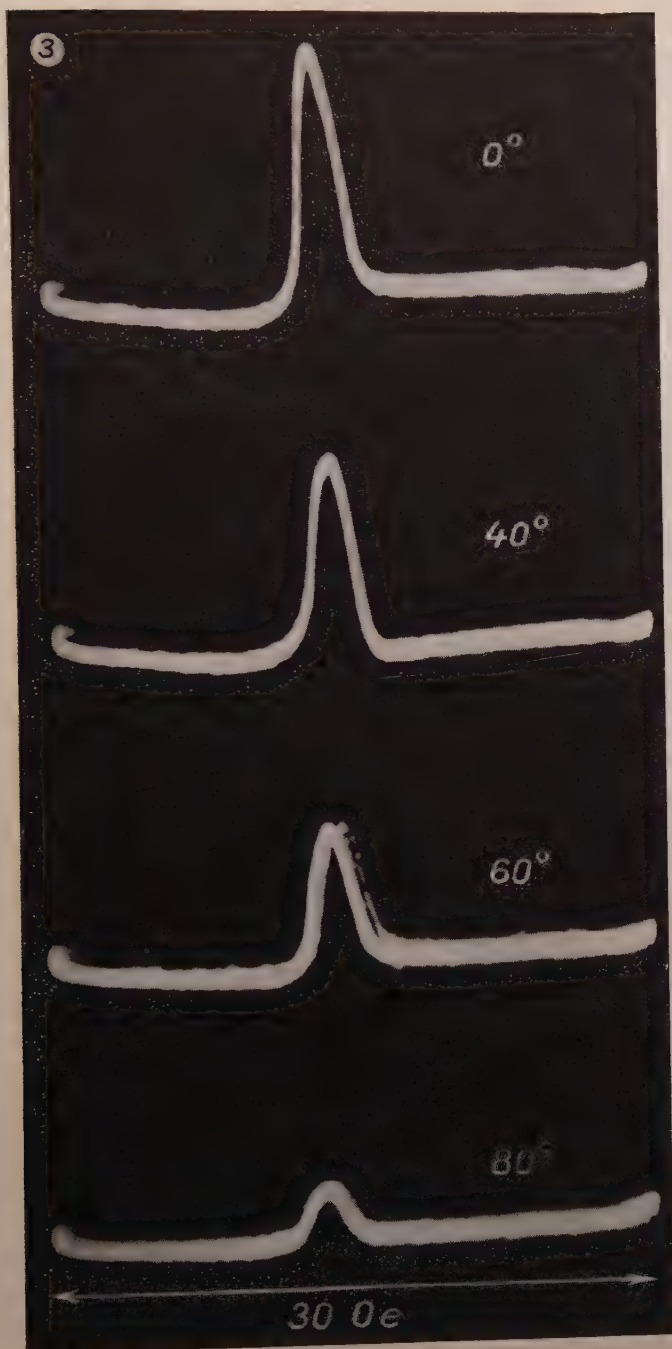


Fig. 3. Variation of the resonance absorption in diphenyl-picryl-hydrazyl with the angle (H_e, E) , when the small cylinder-shaped sample is placed in H -field maximum

d) In H maximum (case 2) we observed absorption and rotation of the plane of polarisation at $(H_e, E) \angle = 45^\circ$. The effect does not change sign, in agreement with the measurements of BATTAGLIA, GOZZINI and POLACCO [2] (Fig. 4).

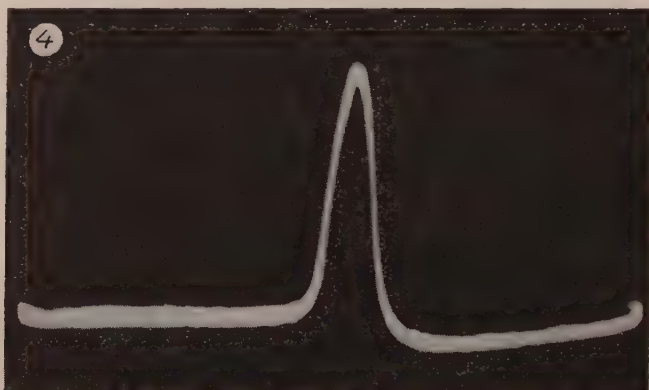


Fig. 4. The rotation of the plane of polarization in DPH at $(H_e, E) \angle = 45^\circ$ with the cylindrical probe

The observed effects can be satisfactorily interpreted using BLOCH's model of precessing magnetic dipoles [3]. A more detailed discussion will appear somewhat later.

We wish to express our thanks to Dr. P. S. FARAGÓ for helpful conversations on the problem, and I. PAVLICSEK for helping to carry out the measurements.

REFERENCES

1. CH. E. RYTER and R. EXTERMAN, *Physica*, **17**, 440, 1951.
2. A. BATTAGLIA, A. GOZZINI and E. POLACCO, *N. Cimento*, **10**, 1205 (L), 1953.
3. F. BLOCH, *Phys. Rev.*, **70**, 460, 1946.

ON THE DIFFERENCE BETWEEN THE DENSITY DISTRIBUTIONS OF NEUTRONS AND PROTONS IN THE NUCLEAR jj -COUPLING SHELL MODEL

By

G. GYÖRGYI and E. RUPP

CENTRAL RESEARCH INSTITUTE OF PHYSICS, DEPARTMENT FOR COSMIC RAYS, BUDAPEST

(Received 19. VI. 1956)

The recent determinations of nuclear radii making use of electromagnetic effects revealed that the protons fill a smaller volume inside the nucleus than the neutrons [1]. We characterize the distributions of the two kinds of nucleons with the aid of the equivalent radius which is defined as follows:

$$R = \left[\frac{5}{3} \langle r^2 \rangle \right]^{1/2}, \quad \langle r^2 \rangle = \int r^2 \varrho(r) dr / \int \varrho(r) dr. \quad (1)$$

R is the radius of that sphere of constant density for which the average of r^2 has the same value as for the nucleon distribution described by the density function $\varrho(r)$.

On the basis of the experiment on μ -mesic atoms and high-energy scattering of electrons the accepted value of the equivalent radius of the proton distribution of nuclei is [1]:

$$R_p = 1.2 \cdot 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm.}$$

For the neutrons we have [1]

$$R_n = 1.4 \cdot 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm.}$$

JOHNSON and TELLER [2] pointed out that a difference between the radii of the distributions of protons and neutrons can be understood qualitatively, if we take into account that the Coulomb field raises the potential valley of protons and so the last protons in a β -stable nucleus are by the reason of their narrower potential valley localized in a smaller region than the neutrons. In the statistical theory of nuclei this effect was discussed quantitatively by MITTELSTAEDT [3].

In the following we summarize the results of the investigation of the same effect in the nuclear jj -coupling shell model. Our calculations were based on the meson valley model of SZAMOSI [4] which was used by him in the interpretation of the magic numbers. With his model he determined the wave functions of pro-

tons and neutrons in the static neutral scalar meson field generated by the nucleon distribution, which was assumed to be of constant density. The Coulomb field acting on protons was also taken into account.

This model is, however, unsuitable to account for the positions of stable nuclei because of the simplifying assumptions made: it gives too large values for the isotopic number $N-Z$. In this way nuclei which are stable in nature show β^+ -activity according to the model. This failure must be eliminated because according to the arguments given by JOHNSON and TELLER the β -stability has an essential influence on the difference between R_n and R_p . MITTELSTAEDT [3] pointed out the probable origin of this failure and a possibility for its solution. He suggests that because of the exchange energy which is the consequence of the antisymmetrization of the wave function the effective nuclear potential field may be different for protons and neutrons even under the assumption of a charge-independent two-nucleon interaction. This circumstance can remove the difficulty encountered in connection with the position of the stable nuclei. In the model of SZAMOSI the antisymmetrization was not taken into account. This explains why nuclei which are stable in nature are radioactive according to the model. The qualitative arguments of MITTELSTAEDT are confirmed by the results of GOMBÁS [5]. His statistical theory of nuclear binding energies in which the exchange energy resulting from antisymmetrization is taken into account, gives the isotopic numbers of the stable nuclei in accord with experience.

In the calculations reported here we used following MITTELSTAEDT's arguments different collective nuclear potentials on a purely phenomenological basis so as to ensure approximately the β -stability of the nucleus discussed. For this purpose the mesic charge of the neutrons was chosen equal to $g_n = 3,4e$, that of protons $g_p = 3,8e$. Thus the difference of the binding energies of the last proton and the last neutron could be reduced to 3,65 MeV in the case of the nucleus ${}_{64}\text{Gd}^{160}$. (If we chose $g_n = g_p = 3,4e$, the last protons were unbound.) Using the parameters mentioned above the wave functions of all protons and neutrons of the ${}_{64}\text{Gd}^{160}$ nucleus have been determined. From these we calculated the density functions:

$$\varrho_p(r) = \sum_{\text{over all protons}} |\psi(r)|^2, \quad \varrho_n(r) = \sum_{\text{over all neutrons}} |\psi(r)|^2.$$

The density functions calculated in this way reproduce in a satisfactory approximation the constant density assumed in the zero order approximation. The equivalent radii obtained for the density distributions of protons and neutrons by means of numerical integration have the following values:

$$R_p = 1,34 \cdot 10^{-13} \text{ A}^{1/3} \text{ cm},$$

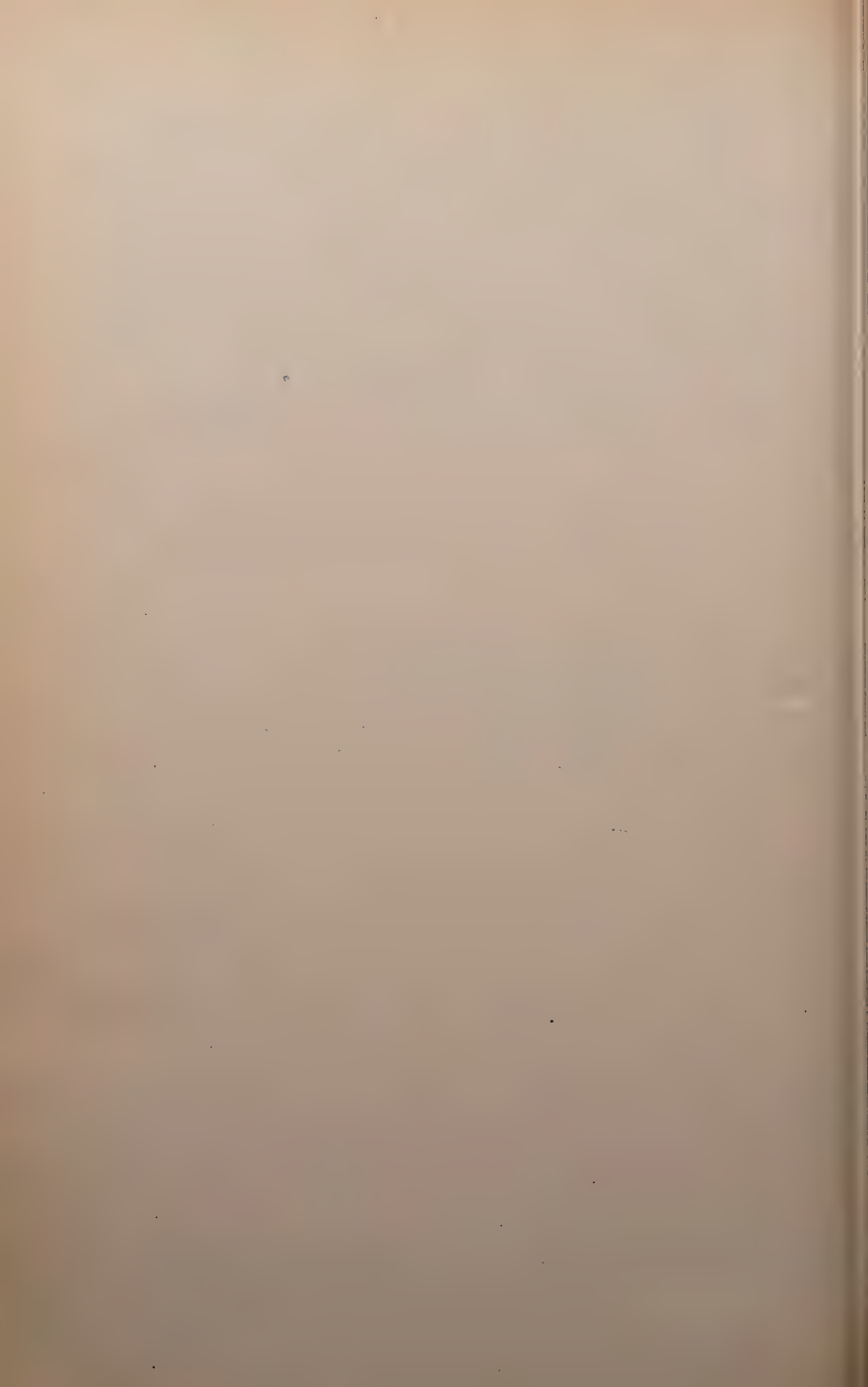
$$R_n = 1,40 \cdot 10^{-13} \text{ A}^{1/3} \text{ cm}. \quad (2)$$

It may be noted that the use of radius definitions other than (1) does not essentially alter the results.) One sees that the shell model developed by SZAMOSI gives a smaller radius for protons than for neutrons. On the quantitative disagreement between (2) and the empirical values we want to make two points. 1. We expect that the assumption of a density distribution which is constant inside the nucleus but falls to zero like a Gaussian distribution at the edge could increase the difference between R_n and R_p . This is suggested by an argumentation similar to that used by JOHNSON and TELLER. (Such a behaviour of the density is suggested by calculations of ROZSNYAI [6] on the shell model level system.) 2. The experimental difference between R_n^* and R_p can have its origin partially in the finite range of nuclear forces [7]. This circumstance can also account for the discrepancy between the experimental and theoretical values.

The authors are indebted to Prof. G. SZAMOSI for making available the tabulated eigenfunctions of his meson valley model.

REFERENCES

1. D. L. HILL, K. W. FORD, *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **5**, 25, 1955.
2. M. H. JOHNSON, E. TELLER, *Phys. Rev.*, **93**, 306, 1954.
3. P. MITTELSTAEDT, *Zs. f. Naturforsch.*, **10a**, 379, 1955.
4. G. SZAMOSI, *Acta Phys. Hung.*, **3**, 243, 1954.
5. P. GOMBÁS, *Acta Phys. Hung.*, **1**, 329, 1952, **2**, 223, 1952.
6. B. ROZSNYAI, *Magy. Fiz. Folyóirat*, **3**, 377, 1955.
7. S. D. DRELL, *Phys. Rev.*, **100**, 97, 1955.



INDEX

Tomus VI

<i>Nikola St. Kalitzin</i> : Über die Wechselwirkung des Nukleons mit dem Mesonfeld — <i>Никола Ст. Калицин</i> : Взаимодействие нуклона с мезонным полем	1
<i>R. Pauncz</i> : Investigation of the Two-Dimensional Homologous Series of Aromatic Compounds — <i>Р. Паунц</i> : Исследование двухмерного гомологического ряда ароматических соединений	15
<i>Л. М. Лямшев</i> : Незеркальное отражение звука тонкими ограниченными пластинками в жидкости — <i>L. M. Liamshev</i> : Non-Specular Reflection of Sound from Thin Bounded Plates Submerged in a Liquid	33
<i>M. A. Ziegler and G. Szamosi</i> : Relativistic Effects in the Theory of the α -Particle — <i>М. А. Циглер и Г. Самоши</i> : Релятивистское рассмотрение α -частицы	67
<i>O. Scari</i> : Das Emissionsspektrum des BiO-Moleküls — <i>О. Скарп</i> : Эмиссионный спектр молекулы BiO	73
<i>P. Szépfalusy</i> : On a New Type of Interaction between Nucleons — <i>П. Сепфалуши</i> : Новый тип межнуклеонного обмена	87
<i>R. Gáspár und K. Molnár-Ivanecsko</i> : Die Eigenfunktionen und Energieeigenwerte der Elektronen des Ag-Atoms mit Elektronenaustausch — <i>Р. Гашпар и К. Мольнар-Иванечко</i> : Собственные функции и энергии электронов атома Ag с учетом обмена электронами	105
<i>R. Gáspár und B. Molnár</i> : Über die Bindung des metallischen Silbers. — <i>Р. Гашпар и Б. Мольнар</i> : О связи металлического серебра	119
<i>R. Gáspár und P. Csavinszky</i> : Die Berechnung der Elektronenverteilung des O^{2-} -Ions mit der Variationsmethode — <i>Р. Гашпар и П. Чавински</i> : Определение распределения электронов O^{2-} иона вариационным методом	125
<i>W. Kołos</i> : Die Weizsäckersche Inhomogenitätskorrektur in dem statistischen Molekülmodell — <i>В. Колос</i> : Коррекция неоднородности Вейцеккера в статистической модели молекулы	133
<i>K. L. Nagy</i> : On the Deduction of the Dirac-Fock-Podolski Equations from the Quantum Theory of Fields	143
<i>F. Berencz</i> : Der Einfluss des Korrelationsfaktors auf die Berechnungen des Grundzustandes des Wasserstoffmoleküls	149
<i>E. Nagy</i> : Theory of Electroluminescence	153
<i>K. Simonyi</i> : Über die Möglichkeit der Nutzbarmachung der Atomenergie ohne Kettenreaktion	157
<i>R. Kovács and L. Solymár</i> : Theory of Aperture Aerials Based on the Properties of Entire Functions of the Exponential Type — <i>Р. Ковач и Л. Шоймар</i> : Обсуждение теории поверхностного излучателя на основе свойств экспоненциальных функций	161
<i>M. Uzsoky and L. Solymár</i> : Theory of Super-Directive Linear Arrays — <i>М. Ужоки и Л. Шоймар</i> : Теория сверхнаправленных линейных излучательных рядов	185

<i>G. Szamosi</i> : Variational Principle and Potential in Relativistic Dynamics — <i>Г. Самоши</i> : Потенциал и принцип вариации в релятивистской динамике	207
<i>E. Friedländer and D. Kiss</i> : An Investigation of Multiple Spurious Discharges in GM-Counters — <i>Э. Фридлендер и Д. Киши</i> : Исследование мультиплетных вторичных разрядов в ГМ-счетчиках	217
<i>L. Pál and T. Tarnóczy</i> : Temperature Dependence of the Differential Susceptibility of Cobalt in Strong Magnetic Fields — <i>Л. Пал и Т. Тарноци</i> : Температурная зависимость дифференциальной восприимчивости кобальта в сильных магнитных полях	225
<i>E. Friedländer</i> : On Multiple Meson Production in Meson-Nucleon Collisions at Very High Energies — <i>Э. Фридлендер</i> : К вопросу о множественном рождении мезонов в соударениях мезона с нуклоном при больших энергиях	237
<i>D. Kisdi</i> : Untersuchung der spontanen Kernspaltung auf Grund des statistischen Kernmodells — <i>Д. Кишди</i> : Исследование спонтанного деления ядер на основе статистической модели ядра	251
<i>L. Medveczky</i> : Investigation of the Energy Spectrum of Neutrons from a Po-Be Source with the Photographic Emulsion Method — <i>Л. Медвецки</i> : Исследование энергетического спектра нейтронов, выходящих из источника Po-Be, методом ядерных эмульсий	261
<i>P. Szépfalusy</i> : Die Hartree-Fock'sche Methode im Falle eines nichtorthogonalen Ein-elektron-Wellenfunktionen-Systems — <i>П. Сепфалуши</i> : Метод самосогласованного поля в случае системы неортогональных волновых функций одного электрона	273
<i>P. Szépfalusy</i> : Die Inhomogenitätskorrektur der Fermischen kinetischen Energie von Teilchen mit halbzahligem Spin — <i>П. Сепфалуши</i> : О коррекции неоднородности энергии кинетической Ферми полуспиновых частиц	293
<i>L. Szász</i> : Calculation of the Electron Affinity of Alkali Atoms and of the Ionization Energy of the Ca Atom — <i>Л. Сас</i> : Расчет электронного сродства щелочных атомов и энергии ионизации атома Ca	307
<i>G. Bozóki, E. Fenyves and L. Jánossy</i> : On the Production of Penetrating Particles by Non-Ionising Cosmic Rays — <i>Г. Бозоки, Э. Феньвеш и Л. Яношиши</i> : Возникновение проникающих частиц под влиянием неионизирующих космических лучей	319
<i>Chr. Christov</i> : Über die Wanderung der Moleküle in einem Gase, I — <i>Хр. Христосов</i> : О движении молекул в газе, I	325
<i>P. Hedvig, L. Németh and G. Schay</i> : Measurement of the Complex Dielectric Constant of Liquids at Microwaves Using the Effect of Multiple Reflexion	337
<i>I. Tarján und Gy. Turchányi</i> : Bemerkung zum Nacken-Kyropoulos'schen Kristallzüchtungsverfahren	339
<i>I. Nagy, D. Pallagi and L. Pál</i> : The Frequency Dependence of the Permeability of Magnetite between 1000 and 3000 MHz.	341
<i>G. Szamosi and M. A. Ziegler</i> : A Possible Correction of the Semi-Empirical Mass Formula	345
<i>P. Csavinsky und E. Kapuy</i> : B. Kockel, Darstellungstheoretische Behandlung einfacher wellenmechanischer Probleme (Buchbesprechung)	347
<i>L. Medveczky and E. Bujdosó</i> : Dark-Field Microscopic Illumination for Energy Measurements of Fast Neutrons with Photographic Emulsions — <i>Л. Медвецки и Э. Буйдошо</i> : Освещение микроскопа с темным полем зрения для измерения энергии быстрых нейтронов при помощи фотоэмульсий	349
<i>G. Marx</i> : Innere Arbeit in der relativistischen Dynamik — <i>Г. Маркс</i> : Внутренняя работа в релятивистской динамике	353

<i>J. Ladik and Mrs. A. Csukás</i> : Determination of the Magnetic Interaction in the H_2 Molecule due to the Motion of two Electrons — <i>Л. Ладик и А. Чукаш</i> : Магнитное взаимодействие двух движущихся электронов	381
<i>R. Pauncz</i> : The Use of Perturbation Methods for Quantum-Chemical Investigations of Systems Built Up from Identical Units — <i>Р. Паунц</i> : Применение методов малых возмущений при квантово-химическом исследовании систем, состоящих из тождественных частей	399
<i>F. Berencz</i> : Die Berechnungen des Grundzustandes des Wasserstoffmoleküls auf Grund des Variationsverfahrens — <i>Ф. Беренц</i> : Расчеты основного состояния молекулы водорода методом вариации	423
<i>D. Kisdi</i> : Über die mit Hilfe des statistischen Kernmodells berechnete Protonendichte I. Teil, Die Bestimmung der Energieterme der Mesonatome — <i>Д. Кишди</i> : Исследование протонной плотности, вычисленной с помощью статистической модели ядра I. Определение энергетических уровней μ мезонного атома ...	443
<i>L. Jánosy, T. Sándor and A. Somogyi</i> : On the Photon Component of Extensive Air Showers — <i>Л. Яношши, Т. Шандор и А. Шомодьи</i> : О фотонном компоненте распространенных ливней космического излучения	455
<i>L. Jánosy and L. Nagy</i> : Experiments on the Rossi Curve — <i>Л. Яношши и Л. Надь</i> : Исследования в связи с кривой Росси	467
<i>J. Nagy und I. Tarján</i> : Über die Züchtung künstlicher Quarzkristalle	485
<i>P. Hedvig</i> : The Paramagnetic Cotton-Mouton Effect in Diphenyl-Picryl-Hydrazyl at Microwaves	489
<i>G. Györgyi and E. Rupp</i> : On the Difference between the Density Distributions of Neutrons and Protons in the jj -Coupling Shell Model	495

